

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

**DENSIDADE ESPECTRAL PARA O MODELO DE ANDERSON DE  
DUAS IMPUREZAS**

OK

*Cíntia Aguiar de Paula*

USP/IFSC/SBI



8-2-001203

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

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

SÃO CARLOS

1998

Paula, Cintia Aguiar de

Densidade espectral para o modelo de Anderson de duas impurezas /  
Cintia Aguiar de Paula.— São Carlos, 1998 .

163 p.

Tese (Doutorado)—Instituto de Física de São Carlos, 1998.

Orientador: Prof. Dr. Luiz Nunes de Oliveira

1. Metais. 2. Modelo de Anderson. 3. Propriedades Dinâmicas

I. Título.



MEMBROS DA COMISSÃO JULGADORA DA TESE DE DOUTORADO DE CINTIA AGUIAR DE PAULA APRESENTADA AO INSTITUTO DE FÍSICA DE SÃO CARLOS, DA UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO, EM 30 DE MARÇO DE 1998.

COMISSÃO JULGADORA:

Prof. Dr. Luiz Nunes e Oliveira/IFSC-USP

Prof. Dr. Lidério Citrângulo Ioriatti Júnior/IFSC-USP

Prof. Dr. Eduardo Miranda/UNICAMP

Prof. Dr. Gilmar Eugênio Marques/UFSCar

Prof. Dr. José Roberto Iglesias/UFRS

Ao Gilberto e à Gabriele.

## **AGRADECIMENTOS**

Ao Prof. Dr. Luiz Nunes de Oliveira pela dedicação, disponibilidade, firmeza, paciência e altíssima competência com que orientou este trabalho.

Ao Prof. Dr. Valter Líbero pela amizade, atenção e incentivo.

Ao Bruno, Raul e Paulo pelo suporte computacional.

Ao Prof. Dr. Paulo César T. D'Ajello e ao Prof. Dr. Wagner Figueiredo pelo apoio, incentivo e amizade.

Ao Gilberto e à Gabriele para os quais não existem palavras que agradeçam todo carinho, compreensão e apoio. À toda minha família, em especial meus pais, Bento e Élia, e aos pais do Gilberto, Wilson e Eluzabete. Esta tese é resultado de um esforço comum de todos nós.

Aos colegas de grupo. Ao João Vítor, Marcelo, Vivaldo, Luiz Ramos e Neemias, com quem tenho compartilhado o dia-a-dia, agradeço as sugestões e a paciência na fase final do trabalho. Ao Klaus pelas discussões e sugestões. Agradeço também à Sandra, à Sílvia e ao Washington pelo auxílio no início do trabalho e pela amizade.

Conheci e convivi com muitas pessoas nestes quatro anos em São Carlos. Todos, direta ou indiretamente, contribuíram para a realização desta tese. Em especial, quero agradecer à Cláudia e ao Alexandre, à Valéria e ao Luiz Mattoso, ao Zé Paulo, à Daniela, ao André, ao Ricardo, ao Henrique, ao Marquinhos e ao Reginaldo, pela amizade.

Ao Maurício Barbi pela amizade sólida e sincera.

Este trabalho foi financiado pela FAPESP, CNPq, CAPES e FINEP.

# ÍNDICE

<b>LISTA DE FIGURAS</b>	<b>i</b>
<b>LISTA DE TABELAS</b>	<b>iv</b>
<b>RESUMO</b>	<b>vi</b>
<b>ABSTRACT</b>	<b>vii</b>
<b>1 – INTRODUÇÃO</b>	<b>1</b>
1.1 - Modelo de Anderson de uma impureza	3
1.2 - Modelo de Anderson de duas impurezas	12
<b>2 – O GRUPO DE RENORMALIZAÇÃO NUMÉRICO</b>	<b>24</b>
2.1 - Características Gerais	25
2.2 - Adaptação do Hamiltoniano de duas impurezas ao GRN	27
2.3 - Discretização Logarítmica	33
2.4 - Procedimento Iterativo	39



<b>4 – RESULTADOS NUMÉRICOS PARA A DENSIDADE</b>	
<b>ESPECTRAL</b>	<b>107</b>
4.1 - Nível de Fermi ( $\varepsilon \rightarrow 0$ )	107
4.2 - Regimes Assintóticos	109
4.2.1 - Regime Kondo	109
4.2.2 - Regime ferromagnético	112
4.2.3 - Regime antiferromagnético	118
<b>5 – CONCLUSÕES</b>	<b>127</b>
<b>APÊNDICE I – TRIDIAGONALIZAÇÃO DA BANDA DE</b>	
<b>CONDUÇÃO</b>	<b>129</b>
<b>APÊNDICE II – CÓDIGO COMPUTACIONAL</b>	<b>136</b>
AII.1 - Características Gerais	136
AII.2 - Características Específicas	138
AII.3 - Dados de Execução	152
AII.4 - Algumas Dificuldades Computacionais	157
<b>REFERÊNCIAS</b>	<b>161</b>

alta par .....	49
2.5 Defasagem da banda de condução no nível de Fermi em função de $I/k_B T_K$ para três valores de $\Delta$ .....	60
2.6 Fluxo de energia versus número de iteração ( $N$ par), para impurezas infinitamente separadas ( regime Kondo) .....	62
2.7 Fluxo de energia versus número de iteração ( $N$ ímpar), para acoplamento entre as impurezas antiferromagnético ( $J = 0.1, k_p R = \pi$ ) .....	67
2.8 Fluxo de energia versus número de iteração ( $N$ ímpar), para acoplamento ferromagnético entre as impurezas ( $J = 0.1, k_p R = \pi/2$ ) .....	68
3.1 Representação esquemática de um experimento de absorção de raio—X .....	73
3.2 Representação esquemática dos resultados obtidos por Doniach e Sunjic para um espectro XPS em metais .....	75
3.3 Esboço da densidade espectral em função da energia para o modelo de Anderson de duas impurezas com $R \rightarrow \infty$ .....	79
3.4 Representação esquemática do estado fundamental do regime antiferromagnético .....	81
3.5 Representação esquemática das possíveis configurações do orbital localizado .....	83
3.6 Esboço da densidade espectral para o modelo de Anderson de duas impurezas no regime antiferromagnético .....	85
3.7 Representação esquemática do estado fundamental do regime ferromagnético .....	86
3.8 Esboço da densidade espectral para o modelo de Anderson de duas impurezas no regime ferromagnético .....	88
3.9 Representação esquemática de um processo de espalhamento que define a matriz $T$ .....	92
3.10 Representação diagramática do processo de espalhamento .....	92
4.1 Densidades espectrais par e ímpar no nível de Fermi .....	108
4.2 Densidade espectral par em função da energia para $k_p R \rightarrow \infty$ .....	110
4.3 Densidade espectral par em escala logarítmica de energia para $k_p R \rightarrow \infty$ .....	111
4.4 Densidade espectral par em escala logarítmica de energia para $k_p R = \pi/2$ .....	113

## LISTA DE TABELAS

2.1	Representação dos estados da base que formam a fase alta e a fase baixa da iteração $N = -1$ .....	40
2.2	Representação dos autovalores e autovetores na fase baixa da iteração $N = -1$ , com $2\varepsilon_d + U = 0$ .....	42
2.3	Representação dos auto-estados da iteração $N$ , fase baixa, que irão formar — após inclusão do operador $f_{(N+1)e\sigma}^+$ — a base ortonormal para $H_{N+1,A}$ .....	43
2.4	Elementos de matriz invariantes dos operadores $c_{de}^-$ e $c_{do}^+$ na iteração $N = -1$ .....	50
2.5	Hamiltoniano do ponto fixo de elétrons livres, para $N$ ímpar, em termos dos operadores de partícula ( $g$ ) e buraco ( $h$ ) que o diagonalizam .....	57
2.6	Hamiltoniano do ponto fixo de elétrons livres, para $N$ par, em termos dos operadores de partícula ( $g$ ) e buraco ( $h$ ) que o diagonalizam.....	58
2.7	Hamiltoniano do ponto fixo com potencial de espalhamento, para $N$ ímpar, em termos dos operadores de partícula ( $g$ ) e buraco ( $h$ ) que o diagonalizam .....	64
2.8	Hamiltoniano do ponto fixo com potencial de espalhamento, para $N$ par, em termos dos operadores de partícula ( $g$ ) e buraco ( $h$ ) que o diagonalizam .....	64
AII.1	Representação da matriz $\langle [q]   [ds]   [p] \rangle$ mostrando os setores nela contidos ao final da iteração $N = -1$ .....	142
AII.2	Dados, $E_{lim}$ , $N_{max}$ , tempo de processamento, memória gasta e erro, referentes a execução do código numérico para impurezas infinitamente	

separadas .....	154
AII.3 Dados, $E_{lim}$ , $N_{max}$ , tempo de processamento, memória gasta e erro, referentes a execução do código numérico para impurezas separadas a uma distância $R = \pi$ .....	155
AII.4 Tempo de processamento numérico para as densidades espectrais do regime antiferromagnético .....	156

## RESUMO

Calculamos a densidade espectral do modelo de Anderson de duas impurezas por meio de uma extensão do grupo de renormalização numérico (GRN) preservando a assimetria partícula-buraco do modelo. O estado fundamental deste modelo depende fortemente da competição entre a interação RKKY  $I$  e a temperatura de Kondo  $T_K$ . Essa competição gera três regimes característicos: (i)  $|I| \ll k_B T_K$ , regime Kondo; (ii)  $-I \gg k_B T_K$ , regime ferromagnético; and (iii)  $I \gg k_B T_K$ , regime antiferromagnético. O Hamiltoniano é invariante sob inversão das coordenadas da impureza  $\pm \vec{R}/2$ . Seus auto-estados, portanto, podem ser classificados de acordo com a paridade. Calculamos as densidades espectrais par e ímpar para os parâmetros representativos do modelo em cada um dos três regimes mencionados acima. Várias características dos resultados numéricos, associadas com a formação de um tripleto ou singleto entre as impurezas e com o efeito Kondo, são discutidas.

## ABSTRACT

We calculated the spectral density for the two-impurity Anderson model by means of an extension of the numerical renormalization-group (NRG) preserving the particle-hole asymmetry of the model. The ground state of this model depends strongly on the competition between the RKKY interaction  $I$  and the Kondo temperature  $T_K$ . That competition generates three characteristic regimes: (i)  $|I| \ll k_B T_K$ , Kondo regime; (ii)  $-I \gg k_B T_K$ , ferromagnetic regime; and (iii)  $I \gg k_B T_K$ , antiferromagnetic regime. The Hamiltonian is invariant under inversion of the impurity coordinates  $\pm \bar{R}/2$ . Its eigenstates can therefore be classified according to parity. We have calculated the even and odd spectral densities for model parameters representative of each of the three above mentioned regimes. Various features of the numerical results, associated with the formation of an impurity singlet or triplet and with the Kondo effect, are discussed.

# CAPÍTULO I

## INTRODUÇÃO

Esta tese se dedica ao cálculo da densidade espectral do modelo de Anderson de duas impurezas. Proposto por Alexander e Anderson [1], em 1964, o modelo de duas impurezas só recentemente começou a ser entendido quantitativamente. Ele desperta muito interesse devido à competição entre a interação RKKY  $I$  [2,3,4] e a temperatura de Kondo  $T_K$  [5]. A interação RKKY tende a alinhar os spins da impureza num acoplamento ferro- ou antiferromagnético dependendo do sinal de  $I$ . No efeito Kondo, abaixo de uma temperatura característica  $T_K$ , cada momento magnético é compensado individualmente pelos elétrons de condução. A competição entre essas duas escalas de energia leva, dependendo da razão  $I/k_B T_K$ , a diferentes estados fundamentais.

Recentemente criou-se uma polêmica [6-13] na tentativa de explicar um ponto crítico com propriedades físicas de um líquido não de Fermi separando o regime Kondo do antiferromagnético [6]. Cálculos usando grupo de renormalização numérico (GRN) encontraram tal ponto crítico, não observado em cálculos de Monte Carlo [8]. Recentemente [13] observou-se que a diferença entre os resultados se deve

à imposição artificial de simetria partícula-buraco nos primeiros cálculos com base no GRN.

Nesta tese, dando sequência ao cálculo da dependência térmica da susceptibilidade magnética [13], calculamos a densidade espectral usando o GRN e preservando a assimetria natural do modelo.

Por carregar ricas informações sobre o estado fundamental, a densidade espectral é uma propriedade cujos resultados são de grande interesse para as interpretações físicas de sistemas eletrônicos fortemente correlacionados.

Dentre suas vantagens, sobre as propriedades termodinâmicas, podemos citar (i) a nítida separação entre excitações do tipo partícula e tipo buraco, (ii) seu comportamento a baixas energias, que ajuda a identificar o regime Kondo e distingui-lo dos regimes ferro- e antiferromagnético e (iii) transparência para interpretações físicas nas regiões de *crossover*.

Para avaliar a precisão de nossos resultados, desenvolvemos uma extensão da fórmula de Langreth [14] que determina a densidade espectral no limite de baixas frequências do modelo de Anderson de duas impurezas.

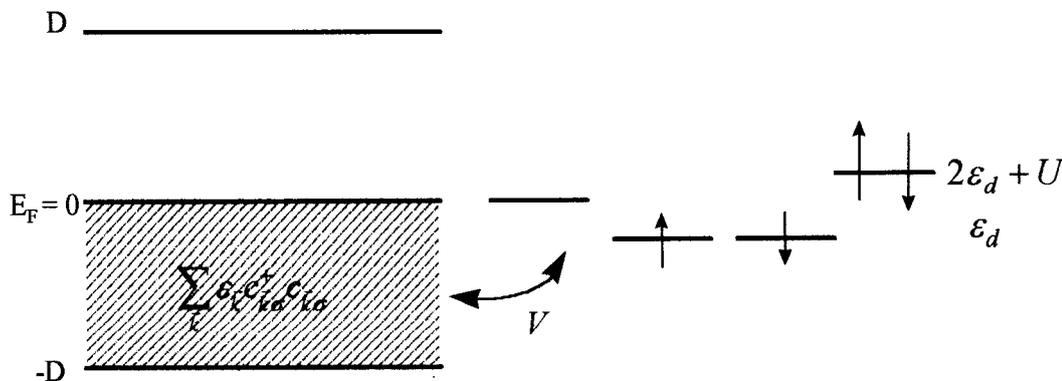
Iniciamos esta tese descrevendo o modelo de Anderson de uma e duas impurezas. A seguir, Cap. II, apresentamos o GRN. O restante da tese, Cap. III e Cap. IV, são destinados à densidade espectral. Dois apêndices complementam a apresentação.

## 1.1 - Modelo de Anderson de uma impureza

Proposto para descrever momentos magnéticos localizados o modelo de Anderson, em sua versão original (uma impureza) [15], se aplica a ligas magnéticas diluídas (metais magnéticos dissolvidos em metais não magnéticos numa concentração menor que um por cento). Momentos magnéticos localizados ocorrem em metais não magnéticos contendo impurezas iônicas com camadas de valência interna (orbitais d ou f) incompletos. Exemplos de impurezas desse tipo são os metais de transição, os lantanídeos e actinídeos.

Anderson supôs o metal hospedeiro não magnético representado por uma banda de elétrons de condução com estados de Bloch de energia  $\varepsilon_{\vec{k}}$  e momentum  $\vec{k}$ . A impureza é um nível separado da banda de condução. O nível acrescentado pela impureza magnética é caracterizado pela energia do orbital  $d$  ( $f$ )  $\varepsilon_d$  com degenerescência de spin  $\sigma$ . O orbital da impureza possui quatro configurações possíveis: vazio, ocupado com um elétron com spin para cima, ocupado com um elétron com spin para baixo ou duplamente ocupado. O acoplamento entre banda de condução e impureza é representado através do elemento de matriz não diagonal  $V$ . A taxa de transição, entre impureza e banda de condução calculada pela regra ouro de Fermi, é  $\Gamma = \pi\rho(\varepsilon_F)V^2$ , onde  $\rho(\varepsilon_F)$  é a densidade de estados de elétrons de condução por spin no nível de Fermi. A repulsão Coulombiana  $U$ , entre elétrons de spins opostos que ocupam o mesmo orbital na impureza, reduz a probabilidade da dupla ocupação do orbital da impureza e, se a energia  $\varepsilon_d$  for negativa, favorece a

ocupação simples do orbital. Uma representação esquemática do modelo é apresentada na Fig.(1.1).



**Figura 1.1** - Modelo de Anderson de uma impureza. O metal hospedeiro, não magnético, é representado por uma banda de elétrons de condução de largura  $2D$  semi-preenchida com estados de energia  $\epsilon_{\vec{k}}$ . A impureza magnética é um nível localizado caracterizado pela energia  $\epsilon_d$ .  $U$  é a repulsão Coulombiana entre elétrons ocupando o mesmo orbital na impureza. A interação do orbital localizado com a banda de condução ocorre via hibridização  $V$ . Quando  $2\epsilon_d + U = 0$  o modelo tem simetria partícula-buraco.

O Hamiltoniano que descreve o modelo de Anderson de uma impureza é

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

onde  $c_{\vec{k}\sigma}^{\dagger}$  cria um elétron com momentum  $\vec{k}$  e spin  $\sigma = \pm 1/2$  na banda de condução enquanto  $c_{d\sigma}^{\dagger}$  cria um elétron no orbital da impureza. Quando  $2\epsilon_d + U = 0$  e a banda de condução é simétrica em relação ao nível de Fermi, o Hamiltoniano possui simetria partícula-buraco, isto é, permanece invariante sob as transformações  $c_{\vec{k}\sigma} \rightarrow c_{-\vec{k}\sigma}^{\dagger}$  e  $c_{d\sigma} \rightarrow -c_{d\sigma}^{\dagger}$ , nesse caso sendo conhecido como modelo simétrico.

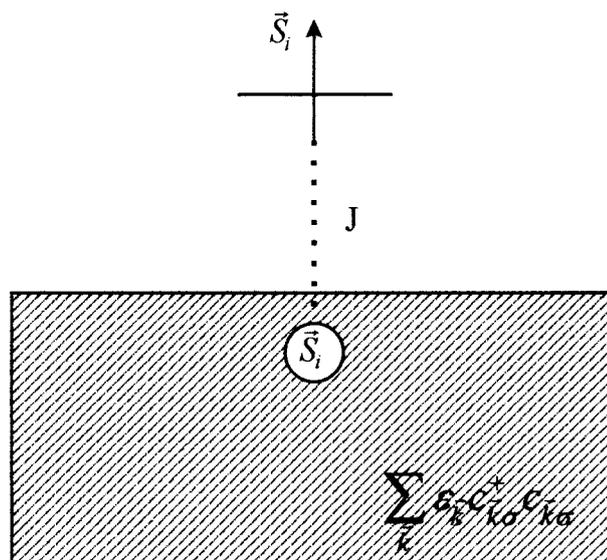
A razão entre as escalas de energia  $U$  e  $\Gamma$  determina o comportamento do modelo de Anderson. Em especial, no caso que a interação Coulombiana é muito

maior que a largura do nível localizado,  $U \gg \Gamma$ , o orbital da impureza é ocupado por um elétron e a impureza é magnética, se  $\varepsilon_d < 0$ . Nesse limite a transformação de Schrieffer-Wolff [16] reduz o modelo de Anderson ao modelo de Kondo de uma impureza como uma interação de troca  $J$  dada por

$$\rho J = -\frac{8\Gamma}{\pi U} = -\frac{8\rho V^2}{U}, \quad (1.2)$$

para  $2\varepsilon_d + U = 0$ .

O modelo de Kondo supõe que, se existe momento magnético na impureza que está inserida no metal, o momento magnético e os spins dos elétrons de condução interagem através de uma interação de troca  $J$ . A Fig. (1.2) mostra o esquema desse modelo.



**Figura 1.2** - Modelo de Kondo de uma impureza. Nesse modelo a impureza possui spin  $\vec{S}_i = \pm 1/2$  e interação de troca  $J$  com o estado mais localizado da banda de condução em volta dela.

Proposto para estudar ligas magnéticas diluídas, o modelo de Kondo teve sucesso quando Kondo, em 1964 [17], explicou a ocorrência do mínimo na

resistividade a baixas temperaturas em ligas metálicas diluídas. Desde então o modelo tem sido amplamente utilizado.

É importante observar que o modelo de Anderson é mais geral que o de Kondo. No primeiro há flutuações na ocupação do orbital da impureza enquanto que no segundo o número de ocupação é inteiro. Devido a equivalência, no limite  $U \gg \Gamma$ , os dois modelos aparecem sempre juntos em estudos de impurezas magnéticas em metais. É justamente nesse limite que estaremos interessados em nosso trabalho. O cálculo da densidade espectral é feito no modelo de Anderson, já que no de Kondo a ocupação sempre simples da impureza anula a densidade espectral.

Os Hamiltonianos como de Anderson e de Kondo foram analisados inicialmente por meio de cálculos perturbativos, os quais apresentavam divergências logarítmicas com o decréscimo da temperatura [15,17]. Seguindo o trabalho de Anderson e Yuval [18], o primeiro tratamento capaz de descrever o espectro completo de temperatura foi desenvolvido por Wilson [5]: o grupo de renormalização numérico (GRN), que determinou a susceptibilidade magnética do Hamiltoniano de Kondo. Em seguida, Krishna-murthy e co-autores [19] aplicaram o mesmo tratamento ao modelo de Anderson. Wilson mostrou que a susceptibilidade passa de uma lei de magnetismo de Curie a altas temperaturas para um paramagnetismo de Pauli a baixas temperaturas. A passagem entre as duas regiões é caracterizada pela temperatura de Kondo  $T_K$ , definida como a energia característica do modelo, dada por

$$T_K = \tilde{D}(\rho J) |\rho J|^{\frac{1}{2}} \exp\left(-\frac{1}{\rho J}\right), \quad (1.3)$$

onde  $\tilde{D}$ , uma função analítica de  $\rho J$ , é da ordem da largura da banda para  $\rho J \ll 1$ .

Resultados do GRN para a susceptibilidade magnética dos modelos de Anderson e de Kondo [5,19] foram obtidos na década de 70; dentro dos devidos limites os dois são praticamente iguais. Resultados para propriedades dinâmicas, como por exemplo densidade espectral foram obtidos empregando-se convoluções na escala logarítmica de energia o que restringia os resultados apenas próximo ao pontos fixos. Mais recentemente, porém, o GRN foi generalizado por Yoshida e co-autores [22], permitindo calcular propriedades dinâmicas mesmo nas regiões de *crossover*. Com essa generalização foi possível também calcular o calor específico do modelo de Anderson, anteriormente impraticável devido ao excessivo custo computacional do método original [23].

A seguir, apresentamos alguns resultados do GRN para o modelo de Anderson de uma impureza. Na Fig.(1.3) mostramos a dependência térmica do calor específico e da susceptibilidade magnética [23] e na Fig.(1.4) a densidade espectral [21].

Na região de altas temperaturas  $k_B T \gg U$ ,  $U, \Gamma$  e  $\varepsilon_d$  podem ser desprezados e temos, assim, um regime de impurezas livres no qual as quatro configurações do orbital da impureza são acessíveis. Sendo a susceptibilidade magnética  $\chi_{imp}$  e o calor específico  $C_{imp}$  da impureza definidos por

$$\frac{k_B T \chi_{imp}}{(g\mu_B)^2} = \langle S_z^2 \rangle$$

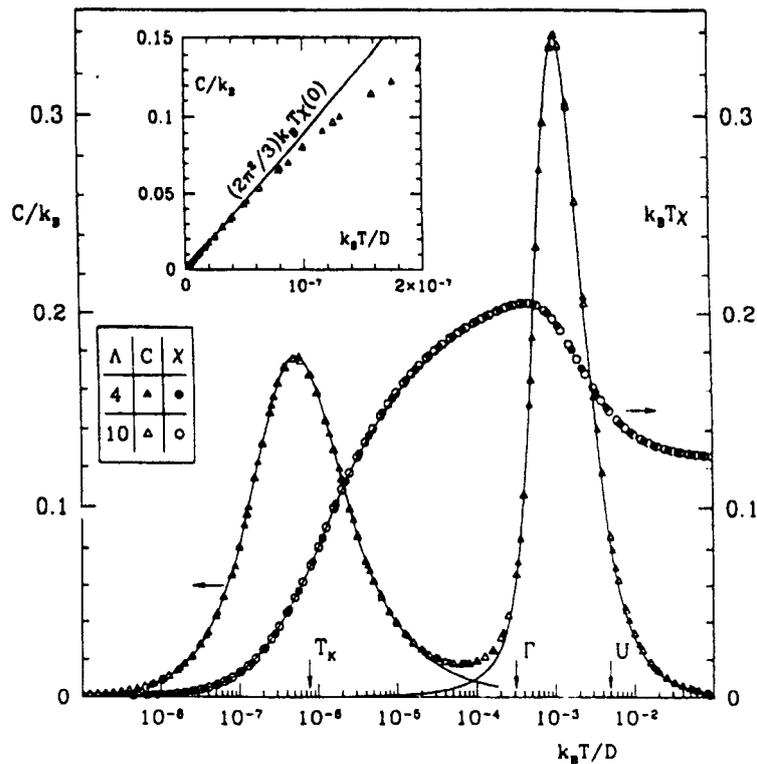
e,

$$C_{imp} = \frac{\partial \langle E \rangle}{\partial T},$$

respectivamente, é fácil observar, neste caso, que  $k_B T \chi_{imp} = 1/8(g\mu_B)^2$  e  $C_{imp} \rightarrow 0$ .

Diminuindo a temperatura, de tal forma que  $k_B T \ll U$ , apenas as configurações ocupadas com um elétron são possíveis e  $k_B T \chi_{imp} = 1/4(g\mu_B)^2$  — lei de Curie. Na região de *crossover*, as configurações duplamente ocupadas e vazia se separam das ocupadas com um elétron, gerando um pico no calor específico.

Diminuindo ainda mais a temperatura, a impureza e os elétrons ao seu redor se acoplam mais fortemente resultando, para  $T < T_K$ , num estado fundamental singlete com o momento local completamente blindado, o efeito Kondo. Os elétrons resultantes comportam-se como partículas livres sendo espalhados pelas impurezas magnéticas e sofrendo um deslocamento de fase  $\delta = \pi/2$ . Esse espalhamento gera uma ressonância centrada no nível de Fermi, a ressonância de Kondo. O efeito Kondo se manifesta no calor específico com um pico próximo a temperatura de Kondo. Para  $T \ll T_K$  com a perda do caráter magnético da impureza,  $k_B T \chi_{imp} \rightarrow 0$  e  $C_{imp} \rightarrow 0$ . A linha cheia a baixas temperaturas é o resultado exato obtido pelo *Bethe-ansatz* e a de altas temperaturas, para o calor específico, é obtida com o modelo de nível ressonante.



**Figura 1.3** - Calor específico ( $C$ ) e susceptibilidade magnética ( $\chi$ ) para o modelo de Anderson de uma impureza com repulsão Coulombiana  $U = 5 \times 10^{-3} D$  e largura de hibridização  $\Gamma = \pi \times 10^{-4} D$ , em função da temperatura. Na região de altas temperaturas,  $k_B T \gg U$ , as quatro configurações do orbital da impureza são acessíveis assim,  $k_B T \chi = 1/8 (g\mu_B)^2$  e  $C \rightarrow 0$ . Diminuindo a temperatura tal que  $k_B T \ll U$  apenas as configurações ocupadas com um elétron são possíveis e  $k_B T \chi = 1/4 (g\mu_B)^2$ . Na região de crossover, entre os dois limites acima, as configurações duplamente ocupada e vazia se separam das configurações ocupadas com um elétron, gerando um pico no calor específico. Outro pico ocorre no calor específico próximo a temperatura de Kondo  $T_K$ . Para  $T \ll T_K$  a impureza se acopla fortemente à banda de condução e perde seu caráter magnético, dando  $k_B T \chi \rightarrow 0$  e  $C \rightarrow 0$ . As linhas sólidas representam curvas universais [23,24]. Resultados extraídos da Ref.[23].

A Fig.(1.4) mostra a densidade espectral em função da energia para três configurações do estado fundamental diferentes. Nos três casos  $\varepsilon_f = -0.1D$ ,  $\Gamma = 0.01D$  e a densidade é normalizada por  $\rho = 2/\pi\Gamma$ . A condição  $|\varepsilon_f| \gg \Gamma$  exclui a configuração vazia  $f^0$  do estado fundamental. Em (a), devido a pequena repulsão Coulombiana, o estado fundamental é duplamente ocupado. Uma energia igual a

$-(\varepsilon_f + U) = -\Delta$  é necessária para remover um elétron da impureza. De acordo com a definição da densidade espectral,

$$\rho(\varepsilon) = \sum_f \left| \langle f | c_f | \Omega \rangle \right|^2 \delta(E_f - E_\Omega - \varepsilon), \quad (1.4)$$

onde  $|\Omega\rangle$  representa o estado fundamental e  $|f\rangle$  todos os possíveis estados finais, ocorre um pico em  $\varepsilon = \Delta$  com meia largura  $\Gamma$ .

Quando aumentamos  $U$ , as configurações ocupadas com um elétron  $f^1$  e a duplamente ocupada  $f^2$  ficam essencialmente degeneradas e o modelo está num regime de valência flutuante, caso (b). Sendo o estado fundamental a combinação das duas configurações ( $f^1$  e  $f^2$ ) o espectro de fotoemissão apresenta para a transição  $f^1 \rightarrow f^0$  uma ressonância centrada em  $\varepsilon = -\varepsilon_f$ . Como o estado final dessa transição tem dois canais de decaimento ( $f^0 \rightarrow f^\uparrow$  e  $f^0 \rightarrow f^\downarrow$ ) este pico é duas vezes mais largo que o pico descrito em (a). A posição do pico referente a transição  $f^2 \rightarrow f^1$  é deslocada devido à renormalização de  $\Delta$  no regime de valência flutuante [21,25].

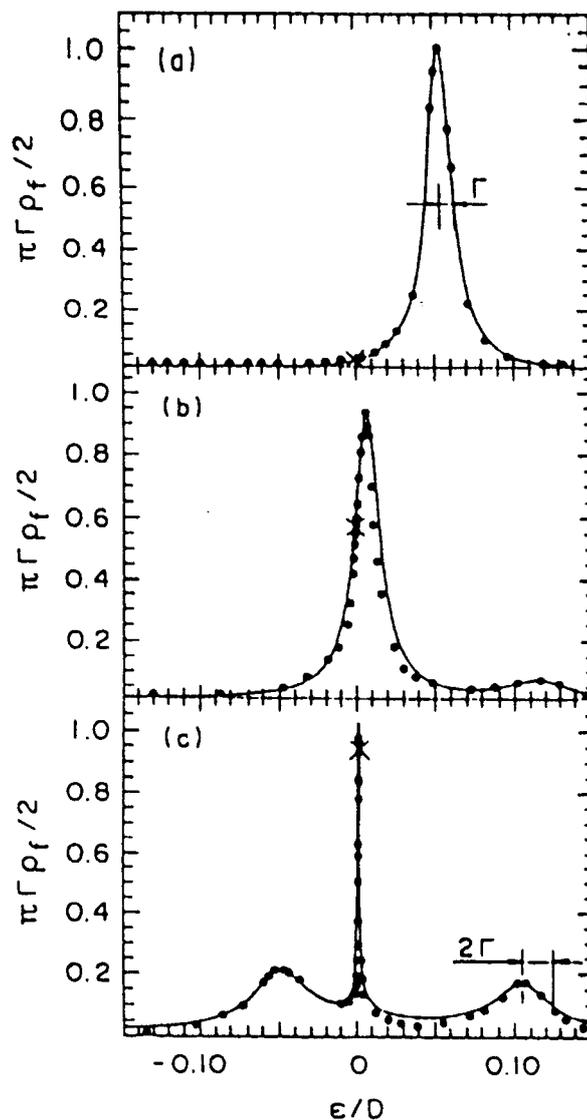
Quando aumentamos ainda mais  $U$ , a configuração  $f^1$  é favorecida, sendo este o regime conhecido como de Kondo, caso (c). A assinatura do regime Kondo é a ressonância no nível de Fermi, já discutida acima. A intensidade deste pico é dada pela equação de Langreth [14]

$$\rho(\varepsilon = 0) = \frac{2}{\pi\Gamma} \sin^2 \delta_F, \quad (1.5)$$

onde  $\delta_F$  é a defasagem da banda de condução no nível de Fermi, que obedece à regra de soma de Friedel [14]

$$\delta_F = \frac{\pi}{2}n, \quad (1.6)$$

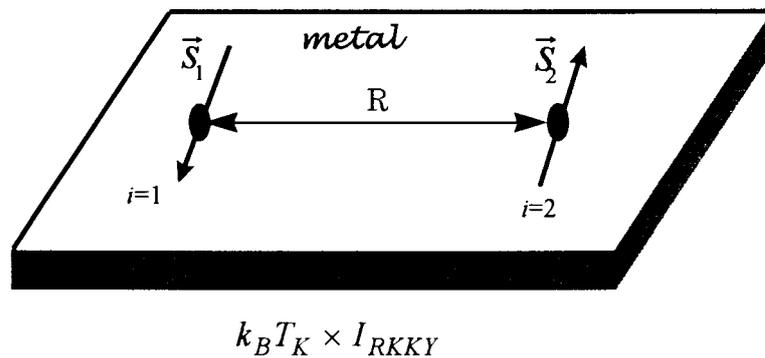
onde  $n$  é a carga ao redor da impureza. Assim,  $\delta_F = \pi/2$  no limite Kondo.



**Figura 1.4** - Densidade espectral para o modelo de Anderson de uma impureza como função da energia. Resultados extraídos da Ref.[25]. Nos três casos  $\varepsilon_d = -0.1D$  e  $\Gamma = 0.01D$ . O caso (a) favorece a dupla ocupação do orbital da impureza,  $U = 0.05D$ ; em (b) configurações ocupadas com um elétron e duplamente ocupadas favorecem flutuações de valência,  $U = 0.105D$ ; em (c) a ocupação com um elétron é favorecida ( $U = 0.15D$ ) gerando o regime Kondo, caso de nosso interesse. No regime Kondo (c) o espectro mostra um pico centrado em  $\varepsilon = 0$ . A densidade espectral no nível de Fermi (x) é dada pela equação de Langreth [14,25].

## 1.2 - Modelo de Anderson de duas impurezas

Semelhante ao modelo de uma impureza, o modelo de duas impurezas é o mais simples que leva em conta a interação entre as impurezas. Na Fig.(1.5) representamos o metal não magnético com as duas impurezas magnéticas ( $i = 1, 2$ ) separadas entre si pela distância  $R$ .



**Figura 1.5** - Modelo de Anderson de duas impurezas. O metal hospedeiro não magnético contém duas impurezas magnéticas ( $i = 1, 2$ ) separadas entre si pela distância  $R$ . Nesse modelo a temperatura Kondo  $T_K$  e a interação RKKY  $I_{RKKY}$  competem levando a diferentes estados fundamentais.

O Hamiltoniano de Anderson de duas impurezas, extensão trivial do Hamiltoniano de uma impureza, é escrito como

$$H = \sum_{\vec{k}\sigma} \varepsilon_{\vec{k}} c_{\vec{k}\sigma}^{\dagger} c_{\vec{k}\sigma} + \varepsilon_d \sum_{\sigma} c_{d\sigma}^{\dagger} c_{d\sigma} + V \sum_{\vec{k}\sigma} \left( e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}_i} c_{\vec{k}\sigma}^{\dagger} c_{d\sigma} + h.c. \right) + U \sum_i c_{d\uparrow}^{\dagger} c_{d\uparrow} c_{d\downarrow}^{\dagger} c_{d\downarrow}, \quad (1.7)$$

diferindo da Eq.(1.1) pelos índices  $i(= 1,2)$  que especifica a impureza, e pelos vetores

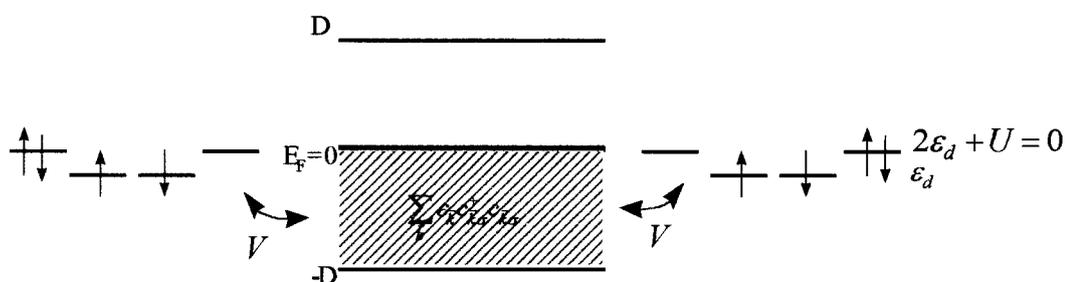
$$\vec{R}_i = \pm \vec{R}/2 \text{ que indicam as posições.}$$

É fácil, observando a Fig.(1.1), ver que a troca da impureza 1 pela 2 não altera o Hamiltoniano. Assim, o problema tem simetria de inversão em relação ao ponto

médio entre as impurezas e esta simetria permite que se separem os estados de condução em canais par e ímpar. No Cap. II escrevemos o Hamiltoniano da Eq.(1.7) em termos dos operadores pares e ímpares, a parte quadrática tem uma forma simples — separa-se em partes par e ímpar — enquanto que o termo de interação das impurezas, quártico, é mais complicado pois nele aparecem todas as combinações de operadores pares e ímpares que conservam paridade.

Na Fig.(1.6) apresentamos uma representação esquemática do modelo, semelhante à Fig.(1.1).

Estamos interessados no limite Kondo, em que  $U = -2\varepsilon_d \gg V^2/D$ , de forma que para energias  $\varepsilon \ll U$  as impurezas tendem a ter ocupação simples, assumindo momentos magnéticos. Usamos  $2\varepsilon_d + U = 0$  para garantir a invariância sob a transformação  $c_{d\sigma} \rightarrow -c_{d\sigma}^+$ . No modelo de uma impureza esta condição é suficiente para que o Hamiltoniano possua simetria partícula-buraco. No caso de duas impurezas, como apresentado no Cap.II, só esta condição não é suficiente. Mesmo com  $2\varepsilon_d + U = 0$  o modelo é assimétrico frente transformação partícula-buraco.



**Figura 1.6** - Representação esquemática do modelo de Anderson de duas impurezas. Assim como no caso de uma impureza, o metal hospedeiro é representado por uma banda de elétrons de condução de largura  $2D$  semi-preenchida com estados de energia  $\varepsilon_k$ . As impurezas magnéticas são níveis localizados caracterizados pela energia  $\varepsilon_d$ .  $U$  é a repulsão Coulombiana entre elétrons ocupando o mesmo orbital da impureza. A interação dos orbitais localizados com a banda de condução ocorre via hibridização  $V$ .

Os elétrons de condução mediam a interação entre as duas impurezas. Essa interação é denominada RKKY [2,3,4] e pode assumir valores negativos ou positivos dependendo da distância  $R$  entre as impurezas, veja Fig.(1.7). No limite  $R \rightarrow \infty$  a interação decai como  $\cos(k_F R)/(k_F R)^3$ . O efeito da interação RKKY é ordenar os spins da impureza — ferromagneticamente se for positiva e antiferromagneticamente se for negativa — enquanto que o efeito Kondo tende a quebrar esse ordenamento, blindando os spins. Essa competição, entre o efeito Kondo e a interação RKKY, delimita regiões características no espaço de parâmetros onde a predominância de um ou outro leva a diferentes estados fundamentais. Os três regimes são caracterizados por valores extremos da razão  $I/T_K$ : i) o regime Kondo ( $|I| \ll k_B T_K$ ), Fig.(1.8); ii) o regime ferromagnético ( $-I \gg k_B T_K$ ), Fig.(1.9); iii) regime antiferromagnético ( $I \gg k_B T_K$ ), Fig.(1.10).

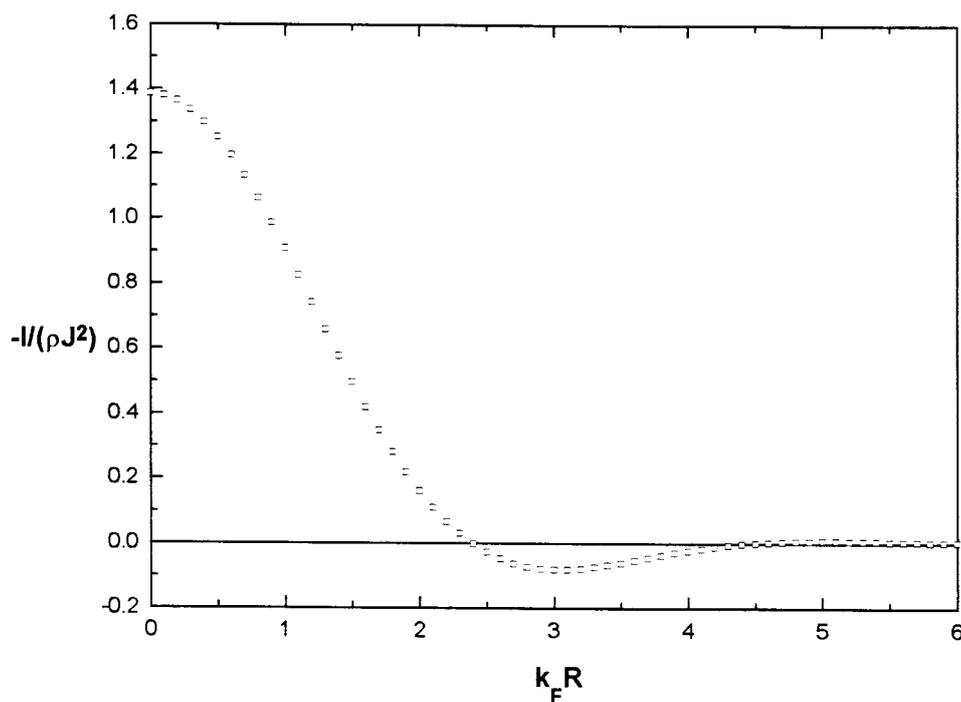
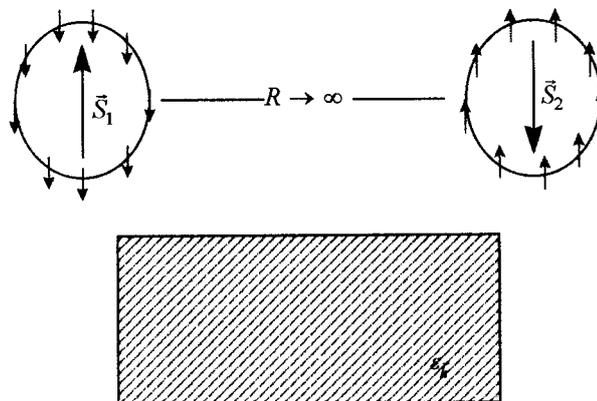


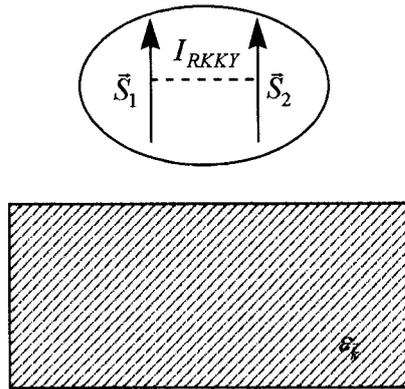
Figura 1.7 - Interação RKKY em função da separação entre as impurezas.

Descrito pela desigualdade  $|I| \ll k_B T_K$ , o regime Kondo se caracteriza por uma separação tão grande entre as impurezas que o acoplamento entre elas é desprezível, reduzindo o problema a dois modelos de uma impureza. Cada impureza se acopla separadamente com os elétrons de condução formando um singleto com os spins da banda de condução, o efeito Kondo. O acoplamento forte, entre impureza e banda de condução, causa então uma defasagem  $\pi/2$  próximo do nível de Fermi.



**Figura 1.8** - Estado fundamental tipo Kondo. Cada impureza tem seus spins compensados pelos spins dos elétrons de condução. Esse acoplamento forte causa uma defasagem  $\pi/2$  nos níveis de condução.

Descrito pela desigualdade  $-I \gg k_B T_K$  o regime ferromagnético leva, a energias moderadamente altas, à formação de um estado tripleto entre as impurezas.



**Figura 1.9** - Estado fundamental com forte interação ferromagnética. As duas impurezas se acoplam formando um tripleto ( $S=1$ ). A blindagem desse spin pela banda de condução ocorre em dois estágios (efeito Kondo de dois estágios) e a defasagem nos níveis de condução é de  $\pi/2$ .

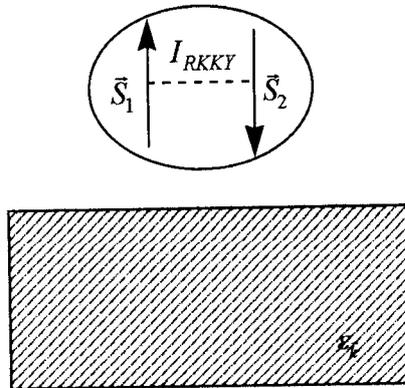
À medida que a energia baixa, os graus de liberdade dos spins vão sendo eliminados em duas etapas. Inicialmente o canal par mais fortemente acoplado as impurezas, para  $\varepsilon \approx k_B T_{Ke}$ , reduz o momento magnético da impureza de  $S=1$  para  $S=1/2$ . Um segundo efeito ocorre para  $\varepsilon \approx k_B T_{Ko}$  quando a banda ímpar blinda o momento magnético do estado com  $S=1/2$  para  $S=0$ . Esse efeito de blindagem em duas etapas é conhecido como efeito Kondo de dois estágios. A soma das defasagens dos canais de condução par e ímpar ( $\delta_{Fe} + \delta_{Fo}$ ) é a defasagem total da banda de condução no nível de Fermi  $\delta_F$ . Neste caso,  $n=2$ , e a Eq.(1.6) fica sendo

$$\delta_{Fe} + \delta_{Fo} = \pi \quad (1.8)$$

Como o deslocamento de fase é definido a menos de  $\pi$ , as fases das bandas par e ímpar são simétricas,  $\delta_{Fe} = -\delta_{Fo} = \delta = \pi/2$ .

Descrito pela desigualdade ( $I \gg k_B T_K$ ) o regime antiferromagnético forte leva, a energias moderadamente altas, à formação de um estado singleto entre as impurezas. O isolamento das impurezas acopladas não afeta muito os elétrons de

condução; conseqüentemente a defasagem é igual a zero. Vemos que a diferença entre as defasagens distingue o regime Kondo do antiferromagnético.



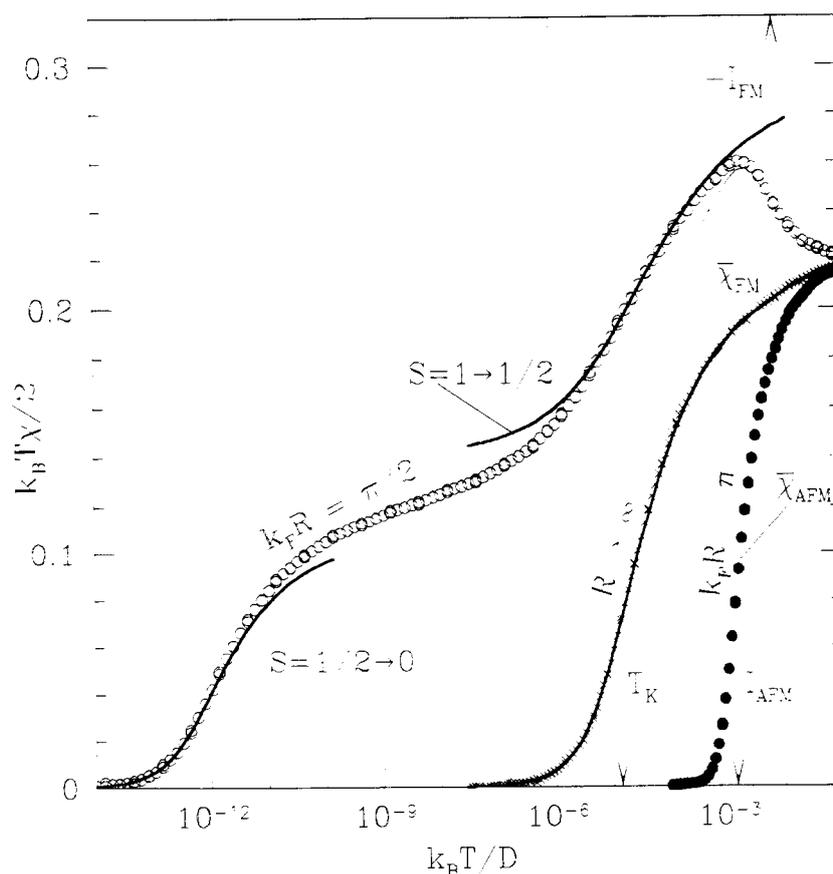
**Figura 1.10** - Estado fundamental com forte interação antiferromagnética. As duas impurezas se acoplam formando um singlete desacopladas da banda de condução. Não ocorre defasagem nos níveis de condução.

Na Fig.(1.11) apresentamos resultados para o momento magnético ao quadrado em função da temperatura [13]. Observe como cada um dos regimes descritos acima é bem caracterizado. Quando  $R \rightarrow \infty$ ,  $I \rightarrow 0$  e o sistema se comporta como duas impurezas isoladas. Ao diminuir a temperatura os spins das impurezas são compensados independentemente pelo efeito Kondo e para  $T < T_K$  o momento líquido está próximo de zero. As cruces ( $\times$ ) referem-se a resultados encontrados pelo GRN. A linha sólida é obtida pelo *Bethe-Ansatz*[26] para a susceptibilidade de duas impurezas isoladas com spin  $1/2$ .

Para  $k_F R = \pi/2$ , acoplamento RKKY ferromagnético, a curva mostra três fases bem distintas. Inicialmente, com o decréscimo da temperatura, as impurezas acoplam-se ferromagneticamente num estado tripleto ( $S = 1$ ). O produto  $k_B T \chi/2$  sobe de  $1/4$ , característico de dois spins isolados, para  $1/3$ , característico de uma

impureza com spin 1, não alcançando este valor devido às interações entre esse spin e os elétrons de condução. Diminuindo a temperatura ocorre o efeito Kondo de dois estágios, redução do momento efetivo das impurezas em duas etapas, de  $S = 1 \rightarrow 1/2$  seguido de  $S = 1/2 \rightarrow 0$ . A curva numérica pode ser bem ajustada pelas curvas do *Bethe-Ansatz* apropriadas para descrever cada região [27].

Para  $k_F R = \pi$ , acoplamento RKKY antiferromagnético, ao diminuir a temperatura as impurezas se acoplam antiferromagneticamente num estado singleto ( $S = 0$ ) e o momento efetivo decai abruptamente a zero para uma temperatura  $T \cong I_{AFM} / k_B$ . Como a temperatura de formação do singleto é muito maior que  $T_K$  não há momento residual a ser compensado pelos elétrons de condução e o efeito Kondo se limita a reduzir a susceptibilidade a altas temperaturas.



**Figura 1.11** - Momento efetivo ao quadrado em função da temperatura para três valores da separação  $R$  entre as impurezas. A curva ( $R \rightarrow \infty, x$ ) é equivalente ao caso de duas impurezas isoladas e serve de referência para os outros casos. No regime ferromagnético ( $k_p R = \pi/2$ ) ocorre o efeito Kondo de dois estágios. As linhas sólidas são resultados obtidos pelo *Bethe-ansatz* [24] para o modelo de uma impureza com spin 1 ( $S = 1 \rightarrow 1/2$ ) e spin  $1/2$  ( $S = 1/2 \rightarrow 0$ ).  $\bar{\chi}_{FM}$  e  $\bar{\chi}_{AFM}$  são curvas fenomenológicas que ajustam muito bem os resultados numéricos[27]. No regime antiferromagnético ( $k_p R = \pi$ ) as impurezas se acoplam num singleto e o momento decai rapidamente a zero. Extraído da Ref.[13].

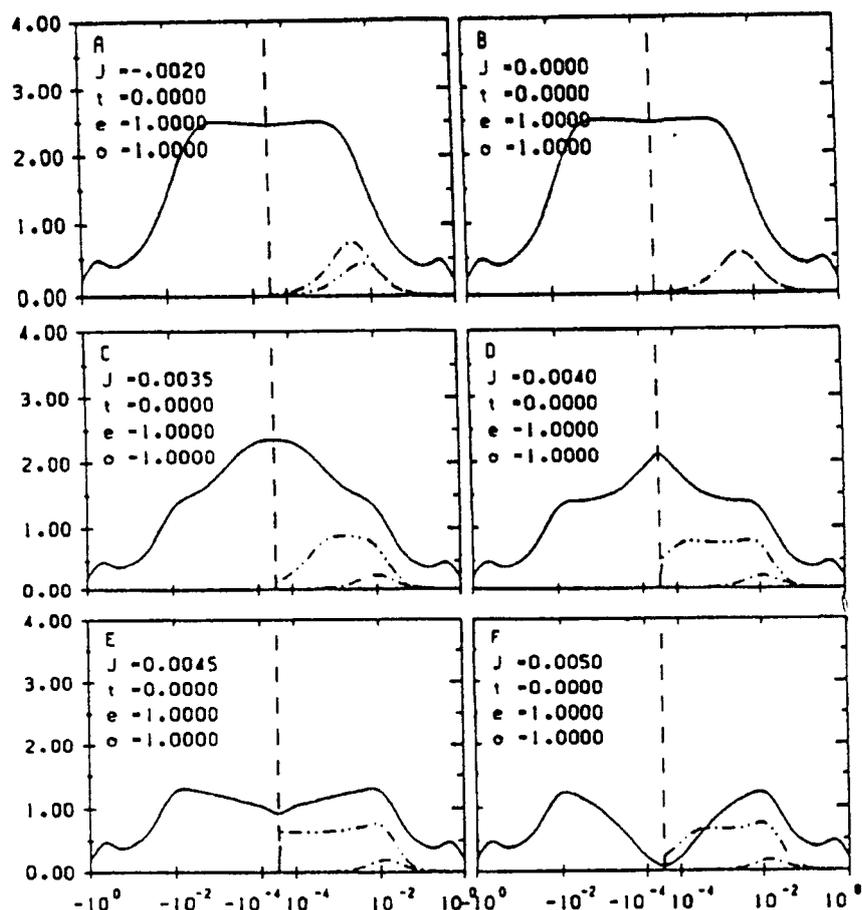
Na Fig.(1.12) apresentamos resultados obtidos por Sakai e co-autores [28] para a densidade espectral do modelo de Anderson de duas impurezas. Esses resultados, obtidos via GRN, não poderiam ser iguais aos nossos pois os autores não preservam a assimetria do modelo. Além disso a precisão dos seus resultados é substancialmente inferior aos nossos. Apesar da diferença dos modelos ao menos qualitativamente os resultados deveriam ser semelhantes. A discrepância mostra que,

na região de energias da ordem da interação RKKY, as curvas da Ref.[28] não são confiáveis.

No modelo simétrico, utilizado por Sakai e co-autores [28] e melhor discutido no Cap.II, a interação RKKY gerada é sempre ferromagnética e a defasagem da banda de condução só pode assumir um dos dois valores, 0 ou  $\pi/2$ . Para compensar e estudar a região antiferromagnética, os autores adicionam ao Hamiltoniano um termo de interação direta entre as impurezas ( $J\vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2$ ). A Fig.(1.12a) corresponde ao regime ferromagnético, (b) ao regime Kondo e as demais (c), (d), (e) e (f) regime antiferromagnético.

O pico que aparece a direita em todos os casos representa a transição do orbital  $f^1$  para  $f^0$  ( $\varepsilon_f = -0.4$ ). Em (a) e (b) a baixas energias aparece a ressonância Kondo centrada no nível de Fermi, como esperado.

Quantitativamente, porém, os resultados deixam a desejar. Em (b), regime Kondo, a densidade espectral deveria ser igual à densidade espectral de uma impureza com valor no nível de Fermi dado pela expressão de Langreth. Observa-se, entretanto, que o valor é cerca de 74% do valor esperado para uma impureza [28,29]. Em (a), regime ferromagnético, não se observa nenhuma evidência da formação do tripleto. Nos demais casos, regime antiferromagnético, no nível de Fermi aparecem valores não esperados. Lembrando que  $\delta = 0$  ou  $\pi/2$ , para o modelo simétrico, a densidade espectral em  $\varepsilon = 0$  só pode assumir o valor 0 ou  $2/\pi\Gamma$ , respectivamente. É fácil observar que isso não ocorre: considerando que (f) e (c) representassem tais valores, (d) e (e) estariam incorretos.



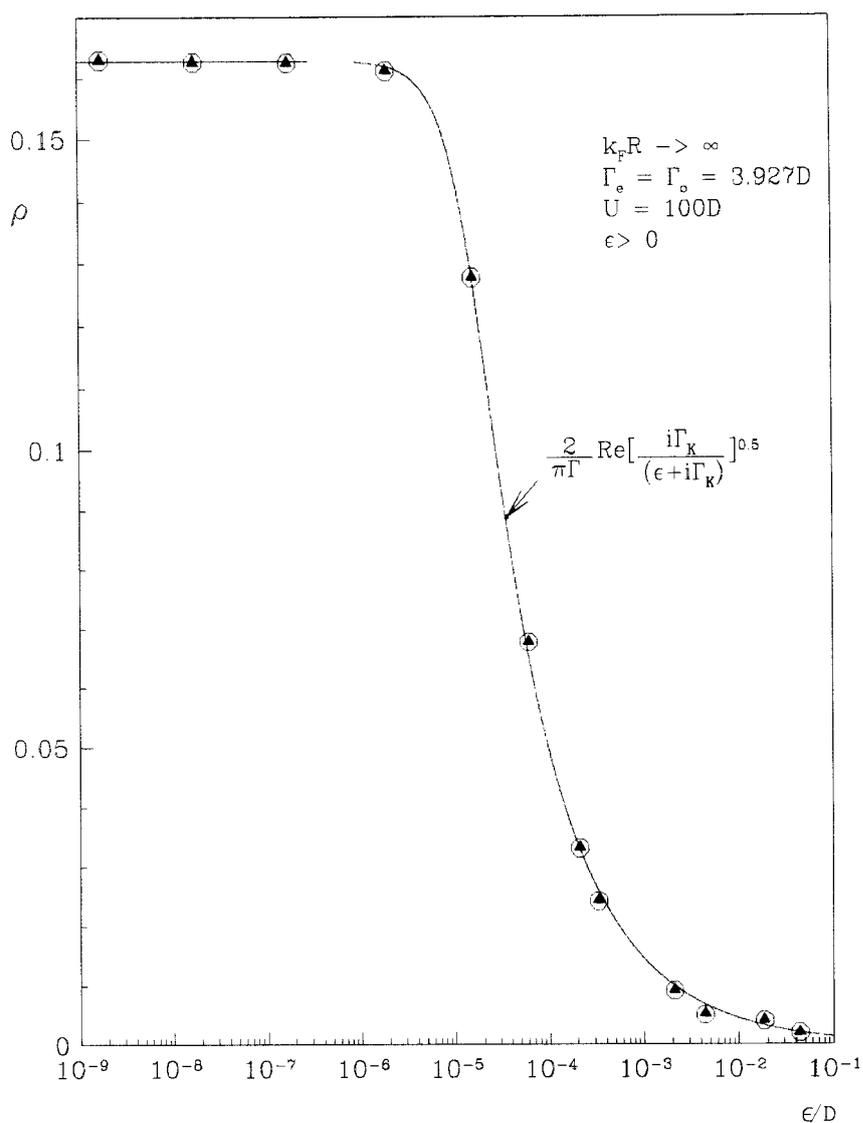
**Figura 1.12** - Intensidades espectrais (linhas contínuas) em função da energia. Resultados extraídos da referência [28] para o modelo de Anderson de duas impurezas. As intensidades espectrais estão multiplicadas pelo fator  $1/4$ . As linhas tracejadas são resultados para a susceptibilidade uniforme e *staggered*. Em (a) o regime é ferromagnético, em (b) Kondo e em (c), (d), (e) e (f) antiferromagnético. O caso (b) corresponde ao modelo de impurezas isoladas mas no nível de Fermi o valor da intensidade espectral é 74% do valor para uma impureza [29].

Nossos resultados apresentam melhor concordância com os valores esperados e mostram a importância de se manter a assimetria do modelo. Na Fig.(1.13), como exemplo, mostramos nossos resultados para as densidades par ( $\blacktriangle$ ) e ímpar ( $\square$ ), no limite das duas impurezas infinitamente separadas. Mais resultados são apresentados no Cap. IV. Neste caso,  $R \rightarrow \infty$ , como discutido anteriormente, as duas densidades espectrais devem ser iguais e igual a densidade espectral de uma impureza. No nível

de Fermi nossos resultados apresentam uma diferença de 0.8% em relação ao valor exato [20]. A linha cheia da Fig.(1.13) é uma expressão fenomenológica

$$\rho(\varepsilon) = \frac{2}{\pi\Gamma} \operatorname{Re} \left[ \frac{i\Gamma_K}{\varepsilon + i\Gamma_K} \right]^{1/2}, \quad (1.9)$$

derivada por Frota e Oliveira [20,30] para a forma da ressonância Kondo no nível de Fermi. Na Eq.(1.9),  $\Gamma_K = k_B T_K / 2\pi \cdot 0.103$ . Na Fig.(1.13)  $\Gamma_K = 1.6 \times 10^{-5} D$  e,  $\Gamma = 3.927 D$ .



**Figura 1.13** - Densidade espectral par ( $\blacktriangle$ ) e ímpar ( $\circ$ ) em função da energia para o modelo de Anderson de duas impurezas obtido em nosso trabalho no limite de impurezas isoladas ( $R \rightarrow \infty$ ). A diferença percentual com o resultado exato [14,20] no nível de Fermi é de 0.8%. A linha cheia (—) é a expressão fenomenológica derivada por Frota e Oliveira [20,30] para a forma da ressonância Kondo. Neste caso,  $R \rightarrow \infty$ ,  $\Gamma = 3.927D$ ,  $\Gamma_K = 1.6 \times 10^{-5}D$ .

A seguir, Cap. II, descrevemos o formalismo do grupo de renormalização numérico e sua aplicação ao Hamiltoniano de Anderson de duas impurezas.

## CAPÍTULO II

# O GRUPO DE RENORMALIZAÇÃO NUMÉRICO

Hamiltonianos como de Kondo e Anderson (1 impureza) foram analisados inicialmente por meio de cálculos perturbativos, os quais apresentavam divergências logarítmicas com o decréscimo da temperatura [1,17]. Seguindo o trabalho de Anderson e Yuval [18], o primeiro tratamento capaz de descrever todo espectro de temperatura foi desenvolvido por Wilson [5], aplicado ao Hamiltoniano Kondo seguido por Krishna-murthy [19] e co-autores, que aplicaram o mesmo tratamento (grupo de renormalização numérico — GRN) ao modelo de Anderson.

Além do GRN surgiram outros métodos não perturbativos como, por exemplo, *ansatz* de Bethe [24], método Monte Carlo [31] e expansão  $1/N$  [32]. Assim com o GRN, esses métodos possuem limitações. Por exemplo, o método Monte Carlo tem problemas para chegar a temperaturas baixas, prejudicando o conhecimento do estado fundamental, o *ansatz* de Bethe não pode ser aplicado em cálculos de propriedades dinâmicas e a expansão  $1/N$  não consegue tratar baixa degenerescência de spin de forma adequada.

O método do GRN, usado neste trabalho, é uma extensão do método tradicional desenvolvido por Wilson para calcular propriedades termodinâmicas. Além da introdução de mais um parâmetro na discretização, como definido nas

referências [22,33], preservaremos a assimetria partícula-buraco natural do modelo, utilizando a extensão desenvolvida recentemente por Lima [27] no processo de tridiagonalização da banda de condução.

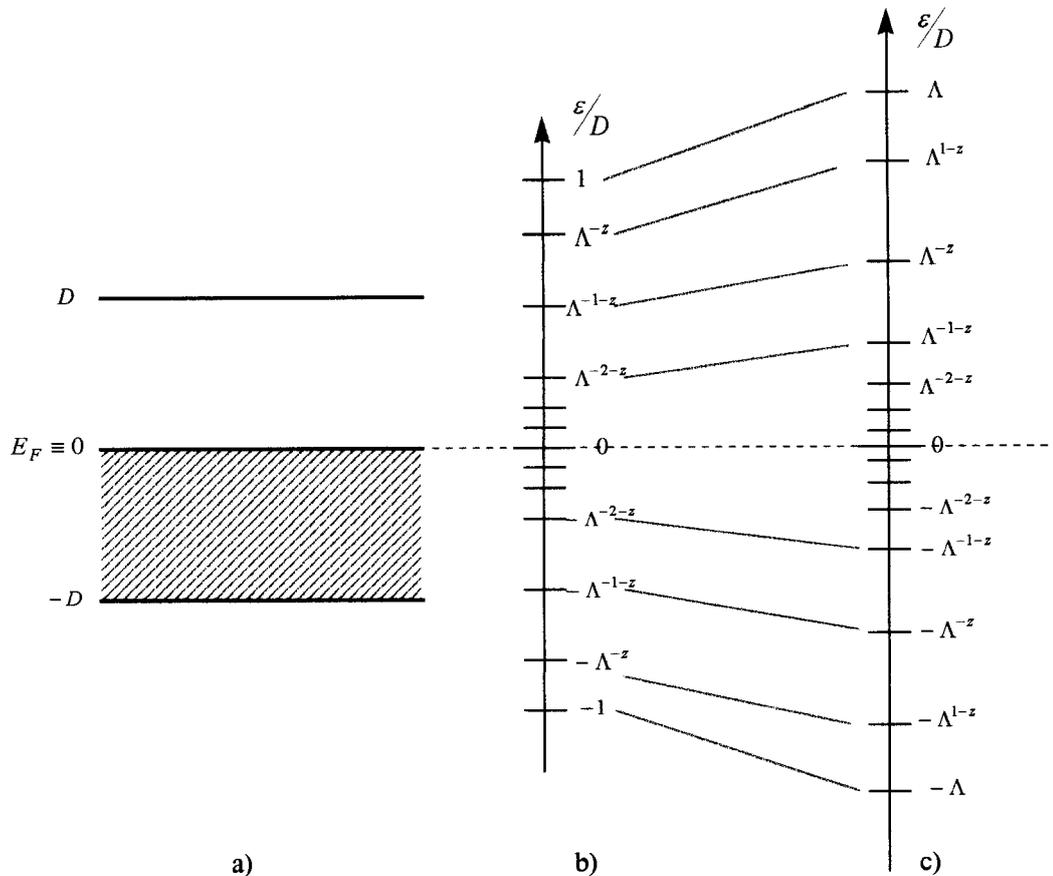
Neste capítulo abordaremos os detalhes do método, suas principais características, adaptação ao modelo de duas impurezas, procedimento computacional e pontos fixos.

## 2.1- Características Gerais

No GRN o contínuo de níveis de energia da banda de condução é substituído por um conjunto de níveis discretos preservando a invariância por mudança de escala da energia na banda de condução. O Hamiltoniano de condução descreve todos os estados possíveis com energias dentro de um espectro contínuo de  $-D$  a  $D$  — uma série infinita de níveis de energia. A temperatura zero, uma banda semi-preenchida terá como seu estado fundamental todos os estados com energia  $\varepsilon_k$  negativa ocupados ( $-D \leq \varepsilon_k \leq \varepsilon_{Fermi} = 0$ ). A Fig.(2.1.a) ilustra essa representação da banda de condução. Qualquer acoplamento com a impureza gera uma infinidade de estados excitados, provocando divergências logarítmicas como observado por teoria de perturbação. Assim sendo, o GRN se baseia em discretização logarítmica da banda de condução [5].

Na forma generalizada [22], a banda é dividida em intervalos de larguras proporcionais  $\Lambda^{-n-z}$ , com  $n = 0,1,2,\dots$ ,  $\Lambda > 1$  e  $0 < z \leq 1$ , como mostrado na Fig.(2.1.b). O espectro contínuo é reproduzido quando  $\Lambda=1$  e a discretização de Wilson [5] quando  $z = 1$ .

A Fig.(2.1.c) mostra a invariância por mudança de escala da energia na banda de condução. Multiplicando por  $\Lambda$  a escala representada em (2.1.b), a estrutura de níveis em torno do nível de Fermi permanece inalterada.



**Figura 2.1** - a) Banda de condução de largura  $2D$  no estado fundamental. b) Discretização logarítmica da banda de condução, definida pelos parâmetros  $\Lambda > 1$  e  $0 < z \leq 1$ . c) Invariância por mudança de escala: multiplicada por  $\Lambda$  a escala representada em (b), a estrutura de níveis em torno do nível de Fermi não muda.

Com a discretização, apenas energias caracterizando cada intervalo são somadas no Hamiltoniano de condução. No caso de 1 impureza o procedimento é definir operadores discretos —  $a_{np\sigma}$  para  $\frac{\varepsilon}{D} > 0$  e  $b_{np\sigma}$  para  $\frac{\varepsilon}{D} < 0$  — que substituirão os operadores  $c_{k\sigma}$  no Hamiltoniano. Apesar da nova base  $(a_{np\sigma}, b_{np\sigma})$  ser discreta, ela ainda é infinita e todos os seus termos se acoplam à impureza. Assim,

uma nova base, a dos  $\{f_{n\sigma}\}$ , obtida por transformação unitária dos operadores  $(a_{np\sigma}, b_{np\sigma})$  (uma transformação de Lanczos [34]), é definida, com isso o acoplamento se dá apenas entre vizinhos próximos. Apenas  $f_{0\sigma}$  se acopla diretamente à impureza, os demais  $f_{1\sigma}, f_{2\sigma}, \dots$  criam funções de onda esféricas em torno da impureza. Para maiores detalhes veja, por exemplo, referências [5,19]. A seguir este procedimento será detalhado para o caso do modelo de duas impurezas.

## 2.2 - Adaptação do Hamiltoniano de duas impurezas ao GRN

O Hamiltoniano de Anderson de duas impurezas, apresentado no Cap. I, é dado por

$$H = \sum_{\vec{k}\sigma} \varepsilon_{\vec{k}} c_{\vec{k}\sigma}^+ c_{\vec{k}\sigma} + \varepsilon_d \sum_{\sigma i} c_{d\sigma i}^+ c_{d\sigma i} + \sum_{\vec{k}\sigma i} V_{\vec{k}} \left( e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}_i} c_{\vec{k}\sigma}^+ c_{d\sigma i} + h.c. \right) + U \sum_i c_{d\uparrow i}^+ c_{d\uparrow i} c_{d\downarrow i}^+ c_{d\downarrow i}. \quad (2.1)$$

A primeira transformação necessária para utilizar o GRN é escrever o Hamiltoniano acima em uma forma unidimensional. Vamos supor a banda de condução isotrópica — relação de dispersão depende apenas do módulo do vetor de onda  $|\vec{k}|$  — indo de  $-D$  a  $D$  com relação de dispersão linear

$$\varepsilon_{\vec{k}} = v_F (k - k_F), \quad (2.2)$$

onde  $v_F$  é a velocidade de Fermi. Esta aproximação não é necessária, mas é conveniente. Resultados anteriores [5,22,27], para modelos de uma e duas

impurezas, mostraram que o efeito da forma da relação de dispersão é irrelevante. A amplitude de hibridização independe da energia ( $V_{\vec{k}} = V$ ), implicando que as impurezas se acoplam apenas com os estados de onda do tipo  $s$ .

Explorando a simetria esférica do acoplamento entre banda de condução e impurezas [Eq.(2.2)], definem-se os operadores de energia

$$c_{\varepsilon\sigma} = \frac{1}{\sqrt{\rho(\varepsilon)}} \int e^{i\frac{\vec{k}\cdot\vec{R}}{2}} \delta(\varepsilon - \varepsilon(\vec{k})) c_{\vec{k}\sigma} d^3\vec{k}, \quad (2.3)$$

$$\bar{c}_{\varepsilon\sigma} = \frac{1}{\sqrt{\rho(\varepsilon)}} \int e^{-i\frac{\vec{k}\cdot\vec{R}}{2}} \delta(\varepsilon - \varepsilon(\vec{k})) c_{\vec{k}\sigma} d^3\vec{k}, \quad (2.4)$$

onde  $\rho(\varepsilon)$  é a densidade de estados, que aparece devido à normalização, e é constante ( $\rho(\varepsilon) = \rho_0$ ). Devemos verificar se estes novos operadores obedecem as relações canônicas de anticomutação. Aplicando as relações de anticomutação nos operadores definidos acima temos que

$$\{c_{\varepsilon\sigma}, c_{\varepsilon'\sigma'}^+\} = \delta(\varepsilon - \varepsilon'), \quad (2.5)$$

$$\{\bar{c}_{\varepsilon\sigma}, \bar{c}_{\varepsilon'\sigma'}^+\} = \delta(\varepsilon - \varepsilon'), \quad (2.6)$$

$$\{c_{\varepsilon\sigma}, \bar{c}_{\varepsilon'\sigma'}^+\} = \frac{1}{\rho_0} \delta(\varepsilon - \varepsilon') \int e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}} \delta(\varepsilon - \varepsilon_{\vec{k}}) d^3\vec{k} = \delta(\varepsilon - \varepsilon') \frac{\text{sen } k(\varepsilon)R}{k(\varepsilon)R} \quad (2.7)$$

e facilmente observamos que não são ortogonais.

Devemos, então, construir novos operadores que sejam ortogonais. Para isso, o mais simples é aproveitarmos a simetria de inversão do nosso modelo e construir esses novos operadores com paridades já definidas. Definimos os operadores

$$c_{\varepsilon p \sigma} \equiv \frac{1}{2A_p(\varepsilon)} [c_{\varepsilon \sigma} \pm \bar{c}_{\varepsilon \sigma}], \quad (2.8)$$

$$c_{d p \sigma} = \frac{c_{d1\sigma} \pm c_{d2\sigma}}{\sqrt{2}}, \quad (2.9)$$

onde,

$$A_p^2(\varepsilon) = \frac{1}{2} \left[ 1 \pm \frac{\text{sen } k(\varepsilon)R}{k(\varepsilon)R} \right], \quad (2.10)$$

é o fator de normalização que depende da energia e da distância  $R$ . O índice  $p = e, o$  indica combinação linear par (+) ou ímpar (-), respectivamente.  $k(\varepsilon)$  é o valor absoluto do momento, isto é,

$$k(\varepsilon) = \frac{\varepsilon}{v_F} + k_F \quad (2.11)$$

Podemos ainda definir os operadores  $f_0$ 's

$$f_{op\sigma} = N_p \int A_p(\varepsilon) c_{\varepsilon p \sigma} d\varepsilon, \quad (2.12)$$

que são combinações lineares dos estados de Wannier mais localizados em torno de cada impureza. O fator de normalização  $N_p$  é dado por

$$N_p^2 = \frac{1}{\int A_p^2(\varepsilon) d\varepsilon}. \quad (2.13)$$

Usando as Eq. (2.10) e (2.11), encontramos que

$$N_p^2 = \frac{2k_F R^{\Delta/D}}{2k_F R \Delta \pm [Si((\Delta + 1)k_F R) - Si((1 - \Delta)k_F R)]}, \quad (2.14)$$

onde  $Si(x) = \int_0^x \frac{\text{sen } x}{x} dx$  e,

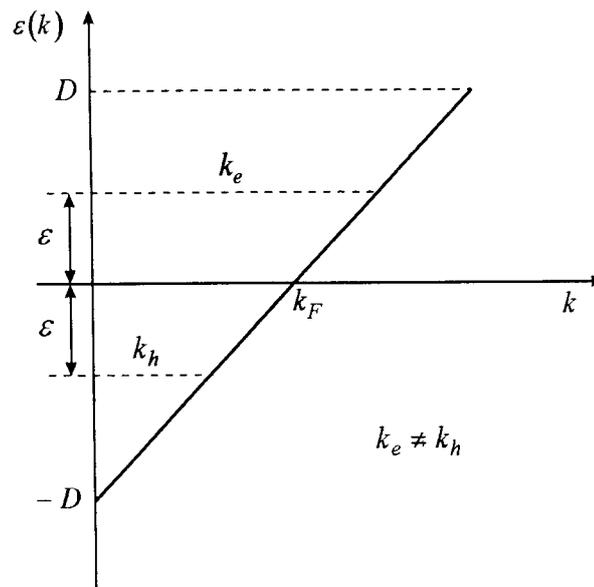
$$\Delta = \frac{D}{v_F k_F}. \quad (2.15)$$

Em termos desses novos operadores o Hamiltoniano da Eq.(2.1) torna-se

$$H = \int d\varepsilon \varepsilon c_{\varepsilon p \sigma}^+ c_{\varepsilon p \sigma} + \sum_{p\sigma} \frac{V}{N_p} (f_{op\sigma}^+ c_{dp\sigma} + h.c.) + H_{imp}, \quad (2.16)$$

onde  $H_{imp}$  é o termo do Hamiltoniano relacionado apenas às impurezas.

Observe na equação acima que a impureza se acopla apenas com os orbitais  $f_{op\sigma}$ , combinações lineares dos elétrons mais localizados em sua volta. Este acoplamento depende da energia pois na Eq.(2.10) o acoplamento  $A_p(\varepsilon)$  é dependente da energia. Na Fig.(2.2) facilmente observamos que uma transformação partícula-buraco ( $\varepsilon \rightarrow -\varepsilon$ ) resulta em momentos diferentes ( $k_\varepsilon \neq k_{-\varepsilon}$ ) e consequentemente os acoplamentos  $A_p(\varepsilon)$  para partícula e buraco com mesma energia, não são iguais. Temos, assim, que o Hamiltoniano é **assimétrico** por transformação partícula-buraco. Essa assimetria é controlada por  $\Delta$  [Eq. (2.15)].



**Figura 2.2** - Representação da assimetria por transformação partícula-buraco. Tomando a relação de dispersão linear para a banda de condução, com energia variando de  $-D$  a  $D$ , elétrons ( $e$ ) e buracos ( $h$ ) com mesma energia  $\varepsilon$ , medida a partir do nível de Fermi, apresentam valores diferentes para o momento  $k_e$  e  $k_h$ , respectivamente.

Trabalhos anteriores (Jones [6,7], Sire [10], Affleck [11], Gan [12]) fizeram a aproximação  $A_p(kR) = A_p(k_F R)$ , ou seja, desprezaram a dependência com a energia.

A aproximação, no entanto, impõe uma simetria inexistente no modelo original, a simetria partícula-buraco. Uma das consequências é que o acoplamento entre as impurezas nunca é antiferromagnético: em função de  $R$  a interação RKKY  $I$  é dada por

$$I(R) = -D(\rho_0 J)^2 2 \ln 2 \left( \frac{\text{sen}(k_F R)}{k_F R} \right)^2,$$

sempre positiva. Para obter acoplamento antiferromagnético deve-se introduzir no Hamiltoniano uma interação direta entre as impurezas. Quando se mantém a assimetria partícula-buraco do modelo, ao contrário, encontra-se que a interação

RKKY oscila em função da distância  $R$ , assumindo valores positivos perto de  $k_F R = (2n+1)\pi$ ,  $n = 0, 1, 2, \dots$

Outra consequência da aproximação é que apenas duas defasagens — satisfazendo a regra de soma de Friedel — são possíveis no nível de Fermi:  $\delta = 0$  e  $\delta = \pi/2$ . Como vimos, o estado fundamental depende da razão  $I/k_B T_K$  podendo derivar do acoplamento singleto entre as impurezas para  $I > k_B T_K$  ( $\delta = 0$ ), ou do acoplamento tripleto para  $-I > k_B T_K$  ( $\delta = \pi/2$ ). Para  $I \approx k_B T_K$  os estados se misturam levando a uma transição de fase, caracterizando um comportamento de líquido não de Fermi, entre as regiões de efeito Kondo ( $\delta = \pi/2$ ) e de acoplamento antiferromagnético ( $\delta = 0$ ).

Iremos evitar essa aproximação ( $k = k_F$ ), manteremos a assimetria natural do modelo seguindo o recente trabalho de Lima [13,27]. A assimetria partícula-buraco controla as propriedades a baixas energias e elimina a descontinuidade descrita acima. A defasagem da banda de condução varia continuamente de 0 a um valor máximo  $\delta_0$  que se aproxima de  $\pi/2$  no limite  $\Delta \rightarrow 0$ . Assim, a mistura — entre os subespaços singleto e tripleto controlada por  $I/k_B T_K$  — gera uma transição suave entre o regime antiferromagnético e o regime Kondo, levando sempre a um comportamento de líquido de Fermi. Na seção que tratamos o ponto fixo de baixas energias, seção (2.6.2), discutimos mais sobre o comportamento da defasagem no modelo assimétrico.

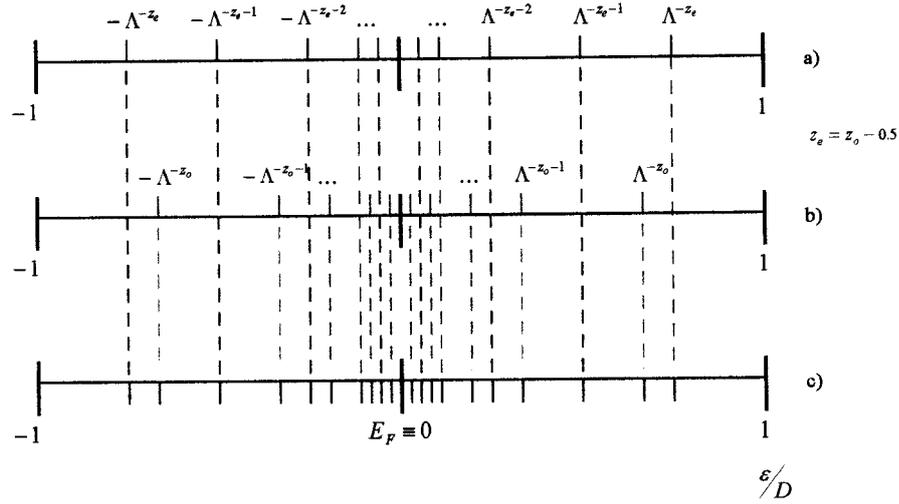
A Eq.(2.16) representa a forma unidimensional do modelo de Anderson de duas impurezas apropriada para aplicar o método do grupo de renormalização

numérico. A seguir apresentamos o procedimento de discretização logarítmica da banda de condução.

## 2.3 - Discretização Logarítmica

Vamos discretizar a banda de condução de maneira semelhante ao procedimento de Wilson para o modelo de uma impureza [5], apresentado na seção (2.1). Faremos, porém, algumas adaptações para o Hamiltoniano de duas impurezas.

Fazendo uso da vantagem da separação da banda de condução em canais par e ímpar, introduzimos diferentes  $z$ 's dependendo da paridade da banda de condução por exemplo  $z_e = 0.5$  e  $z_o = 1.0$ . A consequência disto será o espectro do Hamiltoniano de condução com mais energias para o mesmo valor de  $\Lambda$  e número de iterações, ou seja, a banda de condução é melhor recoberta. A Fig.(2.3) apresenta a banda discretizada seguindo este procedimento [35].



**Figura 2.3** - Discretização das bandas de condução par (e) e ímpar (o) com  $z_e \neq z_o$ . Em (a) representamos a banda par ( $z_e$ ); em (b) representamos a banda ímpar ( $z_o$ ); em (c) a banda de condução completa (banda par + banda ímpar) ao final do processo. Com  $z_e = z_o \pm 0.5$  a banda é melhor recoberta. Se  $z_e = z_o$  (a) e (b) coincidem e (c) possui menos energias discretas.

Com a discretização, da mesma maneira que no caso de 1 impureza [5], definimos os operadores  $a_{pm\sigma}, b_{pm\sigma}$  para cada intervalo

$$a_{pm\sigma} = \frac{\Lambda^{-\frac{m+z_p}{2}}}{(1-\Lambda^{-1})^{1/2}} \int_{\Lambda^{-(m+z_p+1)}}^{\Lambda^{-(m+z_p)}} c_{ep\sigma} d\varepsilon, \quad (2.17)$$

$$b_{pm\sigma} = \frac{\Lambda^{-\frac{m+z_p}{2}}}{(1-\Lambda^{-1})^{1/2}} \int_{-\Lambda^{-(m+z_p)}}^{-\Lambda^{-(m+z_p+1)}} c_{ep\sigma} d\varepsilon, \quad (2.18)$$

com  $m = 0, 1, \dots, \infty$ . No topo da banda,

$$a_{p\sigma} = (1-\Lambda^{-z_p})^{-1/2} \int_{\Lambda^{-z_p}}^1 c_{ep\sigma} d\varepsilon \quad (2.19)$$

e,

$$b_{p\sigma} = (1 - \Lambda^{-z_p})^{-1/2} \int_{-1}^{-\Lambda^{-z_p}} c_{\varepsilon p\sigma} d\varepsilon. \quad (2.20)$$

Com o objetivo de manter intacta a interação entre banda de condução e impureza, faz-se uma transformação unitária do conjunto  $\{a_{pm\sigma}, b_{pm\sigma}\}$  para um novo conjunto ortogonal  $\{f_{np\sigma}\}$  com  $f_{0p\sigma}$  definido anteriormente e os demais  $f_{np\sigma}$  por meio do procedimento de Lanczos [34], diferente agora do caso simétrico [35] pois inclui termos diagonais, de forma que  $f_{np}$  só se acople com  $f_{(n+1)p}$ .

Nessa base encontramos um Hamiltoniano da banda de condução na forma tridiagonal dado por

$$H_{BC} = \sum_{n=0, p\sigma}^{n=\infty} \left[ t_{np} (f_{n,p\sigma}^+ f_{n+1,p\sigma} + h.c.) + \theta_n f_{n,p\sigma}^+ f_{n,p\sigma} \right]. \quad (2.21)$$

O procedimento de tridiagonalização, que consiste em determinar os coeficientes  $t_{np}$  e  $\theta_{np}$ , é apresentado no Apêndice I. Para  $n$  grande, os coeficientes codiagonais comportam-se assintoticamente como

$$t_{np} = \frac{1 + \Lambda^{-1}}{2} \Lambda^{1-z_p-n/2} \quad (n \gg 1) \quad (2.22)$$

O Hamiltoniano, escrito nessa base, pode agora ser truncado mantendo-se exatos os cálculos que dizem respeito à impureza uma vez que o erro introduzido pelo truncamento é independente dos parâmetros  $(U, \varepsilon_d, \Gamma)$  referentes à impureza. O valor de  $n, N$ , onde a série acima vai ser truncada é escolhido de acordo com a escala de energia de interesse do problema, tal que  $t_N^z \ll \varepsilon$ .

Define-se assim um Hamiltoniano adimensional  $H_N$  truncado no  $N$ -ésimo

termo

$$H_N \equiv \frac{1}{D_N} \left[ \sum_{n=0, p, \sigma}^{n=N-1} [t_{np} (f_{n, p\sigma}^+ f_{n+1, p\sigma} + h.c.) + \theta_{np} f_{n, p\sigma}^+ f_{n, p\sigma}] + \theta_{Np} f_{Np\sigma}^+ f_{Np\sigma} + \right. \\ \left. + \varepsilon_d \sum_{p\sigma} c_{dp\sigma}^+ c_{dp\sigma} + \sum_{p\sigma} \frac{V}{N_p} (f_{0p\sigma}^+ c_{dp\sigma} + h.c.) + H(U) \right], \quad (2.23)$$

onde,

$$H(U) = \frac{U}{2} \left[ c_{de}^+ c_{de\uparrow} c_{de\downarrow}^+ c_{de\downarrow} + c_{do}^+ c_{do\uparrow} c_{do\downarrow}^+ c_{do\downarrow} + c_{de}^+ c_{de\uparrow} c_{do\downarrow}^+ c_{do\downarrow} + c_{do}^+ c_{do\uparrow} c_{de\downarrow}^+ c_{de\downarrow} + \right. \\ \left. + c_{de}^+ c_{do\uparrow} c_{de\downarrow}^+ c_{do\downarrow} + c_{do}^+ c_{de\uparrow} c_{do\downarrow}^+ c_{de\downarrow} + c_{de}^+ c_{do\uparrow} c_{do\downarrow}^+ c_{de\downarrow} + c_{do}^+ c_{de\uparrow} c_{de\downarrow}^+ c_{do\downarrow} \right], \quad (2.24)$$

$$D_N = \frac{D(1 + \Lambda^{-1}) \Lambda^{-\left(\frac{N-1}{2} + z - 1\right)}}{2}. \quad (2.25)$$

O Hamiltoniano original é recuperado no limite:  $H = \lim_{N \rightarrow \infty} D_N H_N$ .

$H_N$  pode ser reescrito de uma forma mais conveniente como

$$H_N \equiv \Lambda^{N-1/2} \left\{ \sum_{n=0, p, \sigma}^{n=N-1} \Lambda^{-z/2} [\bar{t}_{np}^z (f_{n, p\sigma}^+ f_{n+1, p\sigma} + h.c.) + \bar{\theta}_{np}^z f_{n, p\sigma}^+ f_{n, p\sigma}] + \Lambda^{N/2} \bar{\theta}_{Np} f_{Np\sigma}^+ f_{Np\sigma} + \right. \\ \left. + \tilde{\varepsilon}_d \sum_{p\sigma} c_{dp\sigma}^+ c_{dp\sigma} + \frac{\tilde{V}_p}{N_p} (f_{0p\sigma}^+ c_{dp\sigma} + h.c.) + H(\tilde{U}) \right\}, \quad (2.26)$$

onde

$$\begin{aligned}\bar{t}_{np}^z &= t_{np} \frac{2}{(1+\Lambda^{-1})D} \Lambda^{z_p-1+\eta/2}, \quad \bar{\theta}_{np}^z = \bar{\theta}_{np} \frac{2}{(1+\Lambda^{-1})D} \Lambda^{z_p-1+\eta/2}, \\ \tilde{V}_p &= V_p \frac{2}{(1+\Lambda^{-1})D} \Lambda^{z_p-1}, \\ H(\tilde{U}) &= H(U) \frac{2}{(1+\Lambda^{-1})D} \Lambda^{z_p-1}.\end{aligned}\quad (2.27)$$

Matematicamente definimos a transformação  $\tau$  do GRN como a mudança do Hamiltoniano quando  $N$  aumenta de um

$$\tau[H_N] = H_{N+1} = \Lambda^{1/2} H_N + \sum_p \bar{t}_{Np} (f_{Np}^+ f_{(N+1)p} + f_{(N+1)p}^+ f_{Np}) + \bar{\theta}_{Np} f_{Np}^+ f_{Np}. \quad (2.28)$$

Esta relação é o aspecto central do formalismo do GRN. Na prática ela permite estabelecer um procedimento recursivo.

Como discutimos anteriormente,  $z_p$  têm dois valores possíveis correspondendo a escalas de energias diferentes. Desta forma o procedimento recursivo é feito em duas etapas e a Eq. (2.28) gera as seguintes relações de recorrência, onde definimos  $p=Alto$  para indicar o valor de  $z$  associado a escala de energia mais alta ( $z=0.5$ ), e  $p=Baixo$  indicando o valor de  $z$  associado a escala de energia mais baixa ( $z=1.0$ ).

$$\begin{aligned}H_{N-1,Alto} &= H_{N,Baixo} + \\ &+ \frac{1}{\Lambda^{1/2}} \left[ \bar{t}_{N,Alto}^z (f_{N,Alto\sigma}^+ f_{N+1,Alto\sigma} + h.c.) + \frac{1}{\Lambda^{1/2}} \bar{\theta}_{N+1,Alto}^z (f_{N+1,Alto\sigma}^+ f_{N+1,Alto\sigma}) \right]\end{aligned}\quad (2.29)$$

$$\begin{aligned}
H_{N+1,Baixo} = \Lambda^{1/2} H_{N+1,Alto} + \\
+ \left[ \bar{t}_{N,Baixo}^{z_{Baixo}} (f_{N,Baixo\sigma}^+ f_{N+1,Baixo\sigma} + h.c.) + \frac{1}{\Lambda^{1/2}} \bar{\theta}_{N+1,Baixo}^{z_{Baixo}} (f_{N+1,Baixo\sigma}^+ f_{N+1,Baixo\sigma}) \right],
\end{aligned}
\tag{2.30}$$

Usamos essas relações de recorrência para diagonalizar o Hamiltoniano. A diagonalização é iterativa, observando-se que para uma determinada temperatura apenas uma faixa de energias contribui e aproveitando-se a hierarquia de escalas discretas. Essa hierarquia, no método tradicional [5,19], é caracterizada pelo número de iterações  $N$ . Na nova abordagem [35], a hierarquia é caracterizada também pelo parâmetro  $z_p$ . Como vimos,  $p$  pode assumir dois valores; conseqüentemente, teremos duas escalas diferentes de energia em cada iteração. O ciclo da transformação de grupo de renormalização só se completa após a entrada dessas duas escalas de energia. Consideramos no decorrer desse trabalho, para fixar as idéias, a fase alta par, isto é,  $z_e = 0.5$  e  $z_o = 1.0$ .

Das relações recursivas podemos observar que a diagonalização do Hamiltoniano  $H_{N+1,Alto}$  é feita usando 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 os autovalores e autovetores  $H_{N+1,Alto}$ . Com isso toda a sequência  $H_N$  é diagonalizada a partir de  $H_{-1}$ , definido apenas pelas duas impurezas.

## 2.4 - Procedimento Iterativo

O Hamiltoniano  $H_{-1}$  é definido apenas pelas duas impurezas e tem a forma

$$\begin{aligned}
 H_{-1} = \varepsilon_d \sum_{p\sigma} c_{dp\sigma}^+ c_{dp\sigma} + \frac{U}{2} & \left[ c_{de\uparrow}^+ c_{de\uparrow} c_{de\downarrow}^+ c_{de\downarrow} + c_{do\uparrow}^+ c_{do\uparrow} c_{do\downarrow}^+ c_{do\downarrow} + c_{de\uparrow}^+ c_{de\uparrow} c_{do\downarrow}^+ c_{do\downarrow} + \right. \\
 & \left. + c_{do\uparrow}^+ c_{do\uparrow} c_{de\downarrow}^+ c_{de\downarrow} + c_{de\uparrow}^+ c_{do\uparrow} c_{de\downarrow}^+ c_{do\downarrow} + c_{do\uparrow}^+ c_{de\uparrow} c_{do\downarrow}^+ c_{de\downarrow} + c_{de\uparrow}^+ c_{do\uparrow} c_{do\downarrow}^+ c_{de\downarrow} + c_{do\uparrow}^+ c_{de\uparrow} c_{de\downarrow}^+ c_{do\downarrow} \right].
 \end{aligned}
 \tag{2.31}$$

Precisamos encontrar os auto-estados e autovalores de  $H_{-1}$ . A fase alta da iteração  $N = -1$  é formada a partir da inclusão do operador  $c_{de\sigma}^+$  no estado vazio  $|\phi\rangle$  e a baixa do operador  $c_{do\sigma}^+$  nos auto-estados da fase alta, resultando em uma matriz  $16 \times 16$ . Esta construção aparece na Tab.(2.1).

Fase Alta	Fase Baixa
$ \phi\rangle$	$ \phi\rangle$ $c_{do\uparrow}^+  \phi\rangle$ $c_{do\downarrow}^+  \phi\rangle$ $c_{do\uparrow}^- c_{do\downarrow}^+  \phi\rangle$
$c_{de\uparrow}^+  \phi\rangle$	$c_{de\uparrow}^+  \phi\rangle$ $c_{do\uparrow}^- c_{de\uparrow}^+  \phi\rangle$ $c_{do\downarrow}^+ c_{de\uparrow}^+  \phi\rangle$ $c_{do\uparrow}^+ c_{do\downarrow}^- c_{de\uparrow}^+  \phi\rangle$
$c_{de\downarrow}^+  \phi\rangle$	$c_{de\downarrow}^+  \phi\rangle$ $c_{do\uparrow}^- c_{de\downarrow}^+  \phi\rangle$ $c_{do\downarrow}^- c_{de\downarrow}^+  \phi\rangle$ $c_{do\uparrow}^+ c_{do\downarrow}^- c_{de\downarrow}^+  \phi\rangle$
$c_{de\uparrow}^+ c_{de\downarrow}^-  \phi\rangle$	$c_{de\uparrow}^- c_{de\downarrow}^+  \phi\rangle$ $c_{do\uparrow}^+ c_{de\uparrow}^+ c_{de\downarrow}^-  \phi\rangle$ $c_{do\downarrow}^+ c_{de\uparrow}^- c_{de\downarrow}^-  \phi\rangle$ $c_{do\uparrow}^+ c_{do\downarrow}^- c_{de\uparrow}^- c_{de\downarrow}^-  \phi\rangle$

**Tabela 2.1** - Representação dos estados da base que formam a fase alta e a fase baixa da iteração  $N = -1$ .  $H_{-1}$  é definido apenas pelas duas impurezas. A fase baixa é formada incluindo o operador  $c_{do\mu}^+$  nos auto-estados da fase alta.

Esta matriz pode ser diagonalizada analiticamente e seus auto-estados e autovalores usados para construir a matriz seguinte.

O Hamiltoniano de Anderson de 2 impurezas apresenta leis de conservação que podem ser exploradas na sua diagonalização. Uma delas, já discutida, é a simetria de inversão em relação ao ponto médio entre as impurezas, já embutido no Hamiltoniano acima. Outras leis de conservação importantes são as conservações de spin e de carga. Os operadores de spin e de carga são definidos como

$$\bar{S}_N = \frac{1}{2} \sum_{p,\mu,\nu} c_{dp\mu}^+ \bar{\sigma} c_{dp\nu} + \frac{1}{2} \sum_{n,p,\mu,\nu} f_{np\mu}^+ \bar{\sigma} f_{np\nu} \quad (2.32)$$

$$Q_N = \sum_{p,\sigma} (c_{dp\sigma}^+ c_{dp\sigma} - 1) + \sum_{n=0}^N \sum_{p\sigma} (f_{np\sigma}^+ f_{np\sigma} - 1) \quad (2.33)$$

Assim, os auto-estados do Hamiltoniano  $H_N$  são auto-estados dos operadores  $Q, S^2$  e  $P$  e vamos rotular tais auto-estados com os números quânticos correspondentes  $Q, S$  e  $P$ , respectivamente.

Na Tab.(2.2) apresentamos os autovetores e autovalores na fase baixa da iteração  $N = -1$ . Os autovetores são escritos também em termos de seus números quânticos  $(Q, 2S, p, r)$ . Definimos  $p = 0$ , se o estado tem simetria par, e  $p = 1$  se sua simetria é ímpar. Usamos  $2S$  para evitar números fracionários e  $r$  para distinguir os autovetores de um mesmo subespaço  $(Q, 2S, p)$ .

Autovetores	$ Q, 2S, p, r\rangle_{-1}$	Autovalores $\times \frac{1}{D_N}$	$g$
$ \phi\rangle$	$ -2, 0, 0, 0\rangle$	0	1
$c_{do\mu}^+  \phi\rangle$	$ -1, 1, 1, 0\rangle$	$-\frac{U}{2}$	2
$c_{de\mu}^+  \phi\rangle$	$ -1, 1, 0, 0\rangle$	$-\frac{U}{2}$	2
$c_{do\mu}^+ c_{de\mu}^+  \phi\rangle$	$ 0, 2, 1, 0\rangle$	$-U$	2
$c_{do\uparrow}^+ c_{do\downarrow}^+ c_{de\uparrow}^+  \phi\rangle$	$ 1, 1, 0, 0\rangle$	$-\frac{U}{2}$	1
$c_{do\uparrow}^+ c_{do\downarrow}^+ c_{de\downarrow}^+  \phi\rangle$	$ 1, 1, 0, 0\rangle$	$-\frac{U}{2}$	1
$c_{do\uparrow}^+ c_{de\uparrow}^+ c_{de\downarrow}^+  \phi\rangle$	$ 1, 1, 1, 0\rangle$	$-\frac{U}{2}$	1
$c_{do\downarrow}^+ c_{de\uparrow}^+ c_{de\downarrow}^+  \phi\rangle$	$ 1, 1, 1, 0\rangle$	$-\frac{U}{2}$	1
$(c_{do}^+ c_{de}^+)_t  \phi\rangle$	$ 0, 0, 1, 0\rangle$	$-U$	1
$(c_{do}^+ c_{de}^+)_s  \phi\rangle$	$ 0, 2, 1, 0\rangle$	0	1
$\frac{(c_{do\uparrow}^+ c_{do\downarrow}^+ - c_{de\uparrow}^+ c_{de\downarrow}^+)}{\sqrt{2}}  \phi\rangle$	$ 0, 0, 0, 0\rangle$	$-U$	1
$\frac{(c_{do\uparrow}^+ c_{do\downarrow}^+ + c_{de\uparrow}^+ c_{de\downarrow}^+)}{\sqrt{2}} \phi$	$ 0, 0, 0, 1\rangle$	0	1
$c_{do\uparrow}^+ c_{do\downarrow}^+ c_{de\uparrow}^+ c_{de\downarrow}^+  \phi\rangle$	$ 2, 0, 0, 0\rangle$	0	1

**Tabela 2.2** - Representação dos autovalores e autovetores na fase baixa da iteração  $N = -1$ , com  $2\varepsilon_d + U = 0$ . Autovetores também são apresentados em termos de seus números quânticos  $(Q, 2S, p, r)$ .  $t$  e  $s$  representam as combinações tripleto e singleto, entre os operadores  $c_{do}^+$  e  $c_{de}^+$ , respectivamente.  $g$  é a degenerescência de spin e  $r$  distingue os autovetores de um mesmo subespaço  $(Q, 2S, p)$ .

Obtidos os auto-estados e autovalores de  $H_{-1}$  ( $N = -1$ ) desejamos passar à iteração  $N = 0$ . Na iteração  $N = 0$  as próximas energias na hierarquia devem ser adicionadas, em nosso procedimento isto significa incluir o termo de hibridização  $f_{0e\sigma}^+$ , gerando uma matriz  $64 \times 64$  que pode ser diagonalizada numericamente. Após a

diagonalização, novos estados serão formados da mesma maneira, incluindo o operador  $f_{0\sigma}^+$ . A nova matriz terá dimensão 256x256. Este processo se repete iterativamente até  $N = N_{MAX}$  incluindo-se a cada fase da iteração o operador  $f_{np\sigma}^+$  correspondente.

De modo geral, os  $L_{NB}$  estados da iteração  $N$ , fase baixa, irão formar  $4L_{NB}$  estados que fornecerão uma base ortonormal para  $H_{N+1,A}$ , como apresentado Tab.(2.3). A matriz Hamiltoniana de  $H_{N+1,A}$  nessa base é obtida calculando os elementos de matriz  ${}_{N+1,A} \langle Q, S, S_z, p, r, l' | H_{N+1,A} | Q, S, S_z, p, r, l \rangle_{N+1,A}$ .

$ Q, S, S_z, p, r, tipo\rangle_{N+1,A}$	$ Q, S, S_z, p, r\rangle_{N,B}$
	$f_{(N+1)e\uparrow}^+  Q, S, S_z, p, r\rangle_{N,B}$
	$f_{(N+1)e\downarrow}^+  Q, S, S_z, p, r\rangle_{N,B}$
	$f_{(N+1)e\uparrow}^+ f_{(N+1)e\downarrow}^+  Q, S, S_z, p, r\rangle_{N,B}$

Tabela 2.3 - Representação dos auto-estados da iteração  $N$ , fase baixa, que irão formar — após inclusão do operador  $f_{(N+1)e\sigma}^+$  — a base ortonormal para  $H_{N+1,A}$ .

Procuramos estados com combinações de  $Q$ ,  $S$ ,  $S_z$  bem definidos, com um pouco de cálculo somos capazes de encontrar a base primitiva para  $H_{N+1,A}$  que é apresentada abaixo.

#### Base primitiva (fase alta par)

$$|Q, S, S_z, p, r, 0\rangle_{N+1,A} = |Q+1, S, S_z, p, r\rangle_{N,B} \quad (2.34)$$

$$\begin{aligned}
|Q, S, S_z, p, r; 1\rangle_{N+1, A} &= \left(\frac{S+S_z}{2S}\right)^{\frac{1}{2}} f_{(N+1)e\uparrow}^+ |Q, S-\frac{1}{2}, S_z-\frac{1}{2}, p, r\rangle_{N, B} + \\
&+ \left(\frac{S-S_z}{2S}\right)^{\frac{1}{2}} f_{(N+1)e\downarrow}^+ |Q, S-\frac{1}{2}, S_z+\frac{1}{2}, p, r\rangle_{N, B}
\end{aligned} \tag{2.35}$$

$$\begin{aligned}
|Q, S, S_z, p, r; 2\rangle_{N+1, A} &= \left(\frac{S+S_z+1}{2S+2}\right)^{\frac{1}{2}} f_{(N+1)e\downarrow}^+ |Q, S+\frac{1}{2}, S_z+\frac{1}{2}, p, r\rangle_{N, B} + \\
&- \left(\frac{S-S_z+1}{2S+2}\right)^{\frac{1}{2}} f_{(N+1)e\uparrow}^+ |Q, S-\frac{1}{2}, S_z-\frac{1}{2}, p, r\rangle_{N, B}
\end{aligned} \tag{2.36}$$

$$|Q, S, S_z, p, r; 3\rangle_{N+1, A} = f_{(N+1)e\uparrow}^+ f_{(N+1)e\downarrow}^+ |Q-1, S, S_z, p, r\rangle_{N, B} \tag{2.37}$$

Passa-se assim a construir o Hamiltoniano  $H_{N+1, A}$ , neste base, utilizando a relação de recorrência, Eq.(2.29),

$$\begin{aligned}
{}_{N+1, A} \langle Q, S, S_z, p, r; l' | H_{N+1, A} | Q, S, S_z, p, r; l \rangle_{N+1, A} &= \\
&{}_{N+1, A} \langle Q, S, S_z, p, r; l' | H_{N, B} | Q, S, S_z, p, r; l \rangle_{N+1, A} + \\
&+ \frac{1}{\Lambda} \left[ {}_{N+1, A} \langle Q, S, S_z, p, r; l' | \bar{\theta}_{N+1, A}^{z_{Aho}} f_{N+1, A\sigma}^+ f_{N+1, A\sigma} | Q, S, S_z, p, r; l \rangle_{N+1, A} \right] + \\
&+ \frac{1}{\Lambda^{\frac{1}{2}}} \left[ {}_{N+1, A} \langle Q, S, S_z, p, r; l' | \bar{t}_{N, A}^{z_{Aho}} (f_{N, A\sigma}^+ f_{N+1, A\sigma} + h.c.) | Q, S, S_z, p, r; l \rangle_{N+1, A} \right]
\end{aligned} \tag{2.38}$$

Os estados, criados a partir dos auto-estados de  $H_{N, B}$ , são auto-estados de  $H_{N+1, A}$ , isto é,

$${}_{N+1, A} \langle Q, S, S_z, p, r; l' | H_{N+1, A} | Q, S, S_z, p, r; l \rangle_{N+1, A} = E_{N, B}(l, p, r), \tag{2.39}$$

onde,

l	(carga, spin)
0	(Q+1, S)
1	(Q, S-1/2)
2	(Q, S+1/2)
3	(Q-1, S)

Para obter os elementos de matriz,

$${}_{N+1,A} \langle Q, S, S_z, p, r; l' | \bar{I}_N^{z, A_0} (f_{N,A\sigma}^+ f_{N+1,A\sigma} + h.c.) | Q, S, S_z, p, r; l \rangle_{N+1,A} = {}_{N+1,A} \langle Q, S, S_z, p, r; l' | H_{NI} | Q, S, S_z, p, r; l \rangle_{N+1,A}, \quad (2.40)$$

usa-se o teorema de Wigner-Eckart [36]. Com isso obtém-se os elementos não diagonais (iteração  $N+1$  fase alta),

$${}_{N+1,A} \langle Q, S, S_z, p, r; 0 | H_{NI} | Q, S, S_z, p, r; 1 \rangle_{N+1,A} = {}_{N,B} \langle Q+1, S+\frac{1}{2}, p, r | f_{NA}^+ | Q, S, p, r \rangle_{N,B}, \quad (2.41)$$

$${}_{N+1,A} \langle Q, S, S_z, p, r; 0 | H_{NI} | Q, S, S_z, p, r; 2 \rangle_{N+1,A} = {}_{N,B} \langle Q+1, S-\frac{1}{2}, p, r | f_{NA}^+ | Q, S, p, r \rangle_{N,B}, \quad (2.42)$$

$${}_{N+1,A} \langle Q, S, S_z, p, r; 1 | H_{NI} | Q, S, S_z, p, r; 3 \rangle_{N+1,A} = \sqrt{\frac{2S}{2S+1}} {}_{N,B} \langle Q+1, S-\frac{1}{2}, p, r | f_{NA}^+ | Q, S, p, r \rangle_{N,B}, \quad (2.43)$$

$${}_{N+1,A} \langle Q, S, S_z, p, r; 2 | H_{NI} | Q, S, S_z, p, r; 3 \rangle_{N+1,A} = -\sqrt{\frac{2S+2}{2S+1}} {}_{N,B} \langle Q+1, S+\frac{1}{2}, p, r | f_{NA}^+ | Q, S, p, r \rangle_{N,B}, \quad (2.44)$$

onde  $\langle \| \| \rangle$  são elementos de matriz invariantes que devem ser calculados após a diagonalização da fase baixa da iteração  $N$ . O operador  $f_{NA}^+$  não atua em estados da fase baixa, na verdade esses elementos de matriz invariantes são atualizados nessa fase do cálculo (iteração  $N$ , fase baixa). Dizemos assim, que na fase baixa da iteração  $N$  atualizamos os elementos de matriz invariantes  ${}_{N,A} \langle \| f_{N,A}^+ \| \rangle_{N,A}$  calculados na fase alta da iteração  $N$ , os quais denominamos elementos *passivos* e calculamos os elementos de matriz invariantes  ${}_{N,B} \langle \| f_{N,B}^+ \| \rangle_{N,B}$ , denominados elementos *ativos*.

Resumindo, para construir a matriz Hamiltoniana na fase alta da iteração  $N+1$  precisamos conhecer,

$$E_{N,B}(Q, S, P, r) {}_{N,B} \langle \| f_{N,A}^+ \| \rangle_{N,B}; \bar{\varepsilon}_{np}^z \text{ e } \bar{\eta}_{np}^z.$$

Além disso, as densidades espectrais par(+) e ímpar(-), que queremos calcular, são definidas à temperatura zero por

$$\rho_{\pm}(\varepsilon, z) = \begin{cases} \sum_f |\langle f | c_{a1} \pm c_{a2} | \Omega \rangle|^2 \delta(\varepsilon + E_f - E_{\Omega}^z) & (\varepsilon < 0) \\ \sum_f |\langle f | c_{a1}^+ \pm c_{a2}^+ | \Omega \rangle|^2 \delta(\varepsilon - E_f + E_{\Omega}^z) & (\varepsilon > 0) \end{cases}, \quad (2.45)$$

com  $|\Omega\rangle$  sendo o estado fundamental e  $|f\rangle$  todos os possíveis estados finais. Os elementos de matriz do tipo  $\langle f | c_{a1} \pm c_{a2} | \Omega \rangle$  precisam a cada iteração ser reprojutados na base - constantemente modificada - dos auto-estados do Hamiltoniano. Estes elementos, como pode ser observado, são semelhantes aos elementos não diagonais apresentados acima. Calculados na iteração  $N = -1$  são a cada fase atualizados.

O cálculo e atualização dos elementos de matriz invariantes se faz através do teorema de Wigner-Eckart [19] e da relação entre a base própria e base primitiva

$$|Q, S, p, r\rangle_{N,B} = \sum_{wl} U(r'; w'l') |Q, S, p, w; l\rangle_{N,B} \quad (2.46)$$

onde  $U(r'; w'l')$  é a matriz de autovetores de  $H_{N,B}$ . Assim os cálculos dos elementos de matriz invariantes tornam-se

$$\begin{aligned} {}_{N+1,A} \langle Q', S', p', r' \| f_{N,B}^+ \| Q, S, p, r \rangle_{N+1,A} &= \\ &= \sum_{w'l', wl} U(r'; w'l') U(r; w, l) {}_{N,B} \langle Q', S', p', w'; l' \| f_{N,B}^+ \| Q, S, p, w; l \rangle_{N,B} \end{aligned} \quad (2.47)$$

com,  ${}_{N,B} \langle Q', S', p', w'; l' \| f_{N,B}^+ \| Q, S, p, w; l \rangle_{N,B}$  dados por

$${}_{N,B} \langle Q+1, S+\frac{1}{2}, p', w'; 1 \| f_{N,B}^+ \| Q, S, p, w; 0 \rangle_{N,B} = 1, \quad (2.48)$$

$${}_{N,B} \langle Q+1, S-\frac{1}{2}, p', w'; 2 \| f_{N,B}^+ \| Q, S, p, w; 0 \rangle_{N,B} = 1, \quad (2.49)$$

$${}_{N,B} \langle Q+1, S-\frac{1}{2}, p', w'; 3 \| f_{N,B}^+ \| Q, S, p, w; 1 \rangle_{N,B} = -\sqrt{\frac{2S+1}{2S}}, \quad (2.50)$$

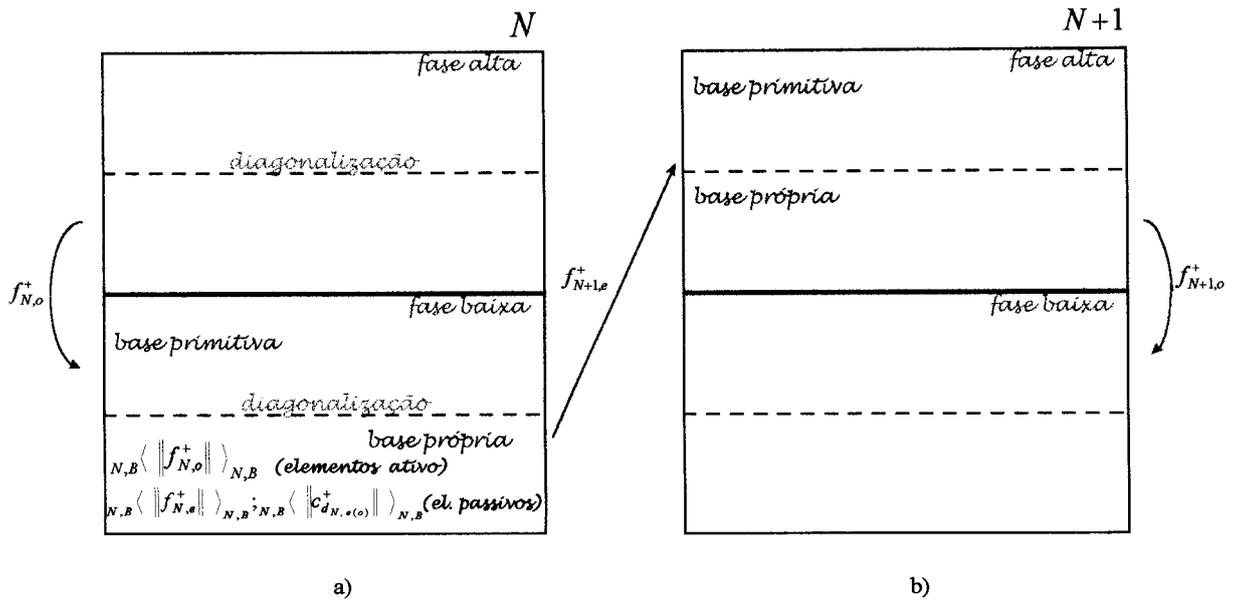
$${}_{N,B} \langle Q+1, S+\frac{1}{2}, p', w'; 3 \| f_{N,B}^+ \| Q, S, p, w; 2 \rangle_{N,B} = \sqrt{\frac{2S+1}{2S+2}}. \quad (2.51)$$

As atualizações são feitas através das equações

$$\begin{aligned}
{}_{N,B} \langle Q+1, S + \frac{1}{2}, p', r' \| f_{N,A}^+ \| Q, S, p, r \rangle_{N,B} &= \\
&= \sum_{ww'} (U(r'; w'0)U(r; w0))_{N,A} \langle Q+1, S + \frac{1}{2}, p', w' \| f_{N,A}^+ \| Q, S, p, w \rangle_{N,A} + \\
&\quad - U(r'; w'1)U(r; w1)_{N,A} \langle Q+1, S + \frac{1}{2}, p', w' \| f_{N,A}^+ \| Q, S, p, w \rangle_{N,A} + \\
&\quad - \left( \frac{\sqrt{(2S+1)(2S+3)}}{2S+2} \right) U(r'; w'2)U(r; w2) \langle Q+1, S + \frac{1}{2}, p', w' \| f_{N,A}^+ \| Q, S, p, w \rangle_{N,A} + \\
&\quad + U(r'; w'3)U(r; w3)_{N,A} \langle Q+1, S + \frac{1}{2}, p', w' \| f_{N,A}^+ \| Q, S, p, w \rangle_{N,A} + \\
&\quad - \frac{1}{(2S+2)} U(r'; w'1)U(r; w2)_{N,A} \langle Q+1, S - \frac{1}{2}, p', w' \| f_{N,A}^+ \| Q, S, p, w \rangle_{N,A}, \\
\end{aligned} \tag{2.52}$$

$$\begin{aligned}
{}_{N,B} \langle Q+1, S - \frac{1}{2}, p', r' \| f_{N,A}^+ \| Q, S, p, r \rangle_{N,B} &= \\
&= \sum_{ww'} (U(r'; w'0)U(r; w0))_{N,A} \langle Q+1, S - \frac{1}{2}, p', w' \| f_{N,A}^+ \| Q, S, p, w \rangle_{N,A} + \\
&\quad - \left( \sqrt{\frac{(2S+1)(2S-1)}{2S}} \right) U(r'; w'1)U(r; w1) \langle Q+1, S - \frac{1}{2}, p', w' \| f_{N,A}^+ \| Q, S, p, w \rangle_{N,A} + \\
&\quad - U(r'; w'2)U(r; w2)_{N,A} \langle Q+1, S - \frac{1}{2}, p', w' \| f_{N,A}^+ \| Q, S, p, w \rangle_{N,A} + \\
&\quad + U(r'; w'3)U(r; w3)_{N,A} \langle Q+1, S - \frac{1}{2}, p', w' \| f_{N,A}^+ \| Q, S, p, w \rangle_{N,A} + \\
&\quad + \frac{1}{2S} U(r'; w'2)U(r; w1)_{N,A} \langle Q+1, S + \frac{1}{2}, p', w' \| f_{N,A}^+ \| Q, S, p, w \rangle_{N,A}. \\
\end{aligned} \tag{2.53}$$

Construída a matriz da fase alta, diagonaliza-se, calcula-se os elementos de matriz invariantes necessários para próxima iteração  $\langle \| f^+ \| \rangle$  e os necessários para o cálculo da densidade espectral  $\langle \| c_d^+ \| \rangle$  e repete-se o procedimento para a fase baixa, acrescentando o operador  $f_{N+1,0\sigma}^+$  e finalmente passa-se para a iteração seguinte. Todos os passos deste processo iterativo, para melhor visualização, são apresentados na Fig.(2.4).



**Figura 2.4** - Representação esquemática do processo iterativo para uma execução fase alta par. a) representa a iteração  $N$  e b) a iteração  $N+1$ . Cada iteração se divide em fase alta, associada à escala de energia mais alta  $\varepsilon_e = \Lambda^{1-z}$ , e a fase baixa, associada à escala de energia mais baixa  $\varepsilon_o = \Lambda^{1-z}$ . Em cada uma das fases, por exemplo na fase baixa, construímos a base primitiva e diagonalizamos a matriz gerando a base própria na qual calculamos os elementos de matriz invariantes dos operadores  $f_{N,e}^+, f_{N,o}^+, c_{d,e}^+, c_{d,o}^+$ . O operador  $f_{N,e}^+$  não atua em estados desta fase (estados ímpares) e o denominamos operador *passivo*. Elementos de matriz envolvendo este operador ( $f_{N,e}^+$ ) precisam ser reprojitados na base - constantemente modificada - dos autoestados do Hamiltoniano. O operador  $f_{N,o}^+$  é nesta fase um operador *ativo* ( atua nos estados da fase). Os operadores  $c_{d,e}^+, c_{d,o}^+$  são calculados na iteração  $N = -1$  e, a cada fase, constantemente atualizados isto é, reprojitados na base. O ciclo do grupo de renormalização só se completa após a entrada das duas escalas de energia (fase alta e fase baixa).

Para passarmos à iteração  $N = 0$ , precisamos ainda calcular os elementos de matriz invariantes ao final da iteração  $N = -1$  (fase baixa). Nesta iteração,  $f_{-1}^+ \equiv c_d^+$ .

Tais elementos podem ser encontrados na Tab.(2.4).

${}_{-1}\langle Q, 2S, p, r \  c_{de,o}^+ \  Q', 2S', p', r' \rangle_{-1}$	valor
$\langle -1, 1, 0, 0 \  c_{de}^+ \  -2, 0, 0, 0 \rangle$	1
$\langle 0, 0, 1, 0 \  c_{de}^+ \  -1, 1, 1, 0 \rangle$	-1
$\langle 0, 2, 1, 0 \  c_{de}^+ \  -1, 1, 1, 0 \rangle$	-1
$\langle 0, 0, 0, 0 \  c_{de}^+ \  -1, 1, 0, 0 \rangle$	1
$\langle 0, 0, 0, 1 \  c_{de}^+ \  -1, 1, 0, 0 \rangle$	-1
$\langle 1, 1, 0, 0 \  c_{de}^+ \  0, 0, 0, 0 \rangle$	$\frac{1}{\sqrt{2}}$
$\langle 1, 1, 0, 0 \  c_{de}^+ \  0, 0, 0, 1 \rangle$	$\frac{1}{\sqrt{2}}$
$\langle 1, 1, 1, 0 \  c_{de}^+ \  0, 0, 1, 0 \rangle$	$\frac{1}{\sqrt{2}}$
$\langle 1, 1, 1, 0 \  c_{de}^+ \  0, 2, 1, 0 \rangle$	$\sqrt{\frac{3}{2}}$
$\langle 2, 0, 0, 0 \  c_{de}^+ \  1, 1, 0, 0 \rangle$	$-\sqrt{2}$
$\langle -1, 1, 1, 0 \  c_{do}^+ \  -2, 0, 0, 0 \rangle$	1
$\langle 0, 0, 0, 0 \  c_{do}^+ \  -1, 1, 1, 0 \rangle$	-1
$\langle 0, 0, 0, 1 \  c_{do}^+ \  -1, 1, 1, 0 \rangle$	-1
$\langle 0, 0, 1, 0 \  c_{do}^+ \  -1, 1, 0, 0 \rangle$	-1
$\langle 0, 2, 1, 0 \  c_{do}^+ \  -1, 1, 0, 0 \rangle$	1
$\langle 1, 1, 1, 0 \  c_{do}^+ \  0, 0, 0, 0 \rangle$	$-\frac{1}{\sqrt{2}}$
$\langle 1, 1, 1, 0 \  c_{do}^+ \  0, 0, 0, 1 \rangle$	$\frac{1}{\sqrt{2}}$
$\langle 1, 1, 0, 0 \  c_{do}^+ \  0, 0, 1, 0 \rangle$	$\frac{1}{\sqrt{2}}$
$\langle 1, 1, 0, 0 \  c_{do}^+ \  0, 2, 1, 0 \rangle$	$-\sqrt{\frac{3}{2}}$
$\langle 2, 0, 0, 0 \  c_{do}^+ \  1, 1, 1, 0 \rangle$	$-\sqrt{2}$

Tabela 2.4 - Elementos de matriz invariantes dos operadores  $c_{de}^-$  e  $c_{do}^+$  na iteração  $N = -1$ , calculados das Eqs.(2.48), (2.49), (2.50) e (2.51).

O processo descrito acima repete-se a cada uma das fases da iteração, modificando-se evidentemente o número da iteração e a referência aos operadores alto e baixo.

## 2.5 - Procedimento Computacional

O objetivo desta seção é descrever as principais características do procedimento computacional que executa o processo iterativo descrito nas seções anteriores. Maiores detalhes podem ser encontrados no Apêndice II.

Desenvolvido em linguagem C++, o código computacional segue os princípios de Programação Orientada para Objetos (POO) [38,39]. Um sistema POO é construído ao redor de um conjunto de classes que caracterizam o comportamento de todos os dados básicos do sistema. Entre as principais vantagens de se construir um sistema desse tipo podemos citar três que, para nós, são essenciais: i) o código é facilmente reaproveitável; ii) o código é facilmente depurável; iii) uso de alocação e liberação dinâmica de memória.

Utilizamos, para executar os cálculos, um microcomputador Pentium 233MHz (128 Mbytes de memória *RAM*, 512 Mbytes de *swap*) e uma estação de trabalho HP C160 (256 Mbytes de *RAM* e 512 Mbytes de *swap*).

No GRN, o número de estados, e conseqüentemente o tamanho da matriz Hamiltoniana, na diagonalização iterativa cresce na proporção  $16^N$ , de modo que rapidamente a memória disponível no computador é ocupada. Apesar da redução no

tamanho das matrizes, devido ao uso das leis de conservação e alocação dinâmica de memória, calcular todos os estados de  $H_N$  para  $N$  grande é impossível. Assim, calculamos uma janela de energias,  $E_{\text{lim}} \Lambda^{-(N-1)/2} \leq \varepsilon \leq E_{\text{lim}} \Lambda^{-(N+1)/2}$ , onde  $E_{\text{lim}}$  é um número, em princípio arbitrário, cujo valor é estabelecido em função da velocidade e processamento que se dispõe. Inicialmente nossos resultados foram obtidos considerando  $E_{\text{lim}} = 16$  nas primeiras iterações ( $N < 4$ ) aumentando seu valor para 25, nos regimes Kondo e antiferromagnético, e para 30 no regime ferromagnético. Repetindo-se o processo para  $N = 1, 2, 3, \dots, N_{\text{max}}$  conseguimos, justapondo as janelas, obter as curvas completas. Escolhemos  $N_{\text{max}}$  quando a transformação  $\tau^2$  mantém  $H_N$  invariante:  $H_N \cong \tau^2[H_N] \equiv H_{N+2}$  o que mostra que chegamos a um ponto fixo estável.

Em geral, nos regimes Kondo e antiferromagnético  $N_{\text{max}} = 21$  e no ferromagnético  $N_{\text{max}} = 37$ . O tempo de processamento é de aproximadamente 1 dia para  $z_e = 0.5$  e  $z_o = 1.0$  e 4 horas para  $z_e = 0.1$  e  $z_o = 0.6$ .

A memória utilizada chega a alcançar em alguns casos 250 Mbytes. Mais informações sobre a construção do código computacional e dados referentes a sua execução são descritos no Apêndice II.

## 2.6- Pontos Fixos

Como apresentado na seção (2.3) o método do GRN, baseado na transformação  $\tau [H_N] = H_{N+1}$ , permite definir um processo recursivo de diagonalização. A transformação, como definida na Eq.(2.28),

$$H_{N+1} = \Lambda^{1/2} H_N + \bar{t}_{Np}^z (f_{Np\sigma}^+ f_{N+1,p\sigma} + h.c.) + \Lambda^{-1/2} \bar{\theta}_{N+1,p\sigma}^z f_{N+1,p\sigma}^+ f_{N+1,p\sigma}, \quad (2.54)$$

é uma transformação típica do grupo de renormalização. A transformação  $\tau$  têm como entrada um conjunto de autovalores e auto-estados de  $H_N$  produzindo como saída um conjunto de autovalores e auto-estados de  $H_{N+1}$ . Um ponto fixo  $H^*$  da transformação  $\tau$  é um Hamiltoniano que se mantém invariante sob essa operação, isto é,  $\tau [H^*] = H^*$ . Na realidade, como mostramos, os pontos fixos para  $N$  par e  $N$  ímpar são diferentes, assim, **só existem pontos fixos da transformação do grupo de renormalização  $\tau^2 [H_N] = H_{N+2}$  (aplicação do operador  $\tau$  duas vezes).**

Um ponto fixo de  $\tau^2$  é caracterizado numericamente pela repetição do conjunto de autovalores de muitos corpos e dos elementos de matriz  $f_N$  a cada duas iterações.

À medida que o número de iterações aumenta,  $H_N$  passa por vários pontos fixos, até atingir o ponto fixo estável caracterizando o estado fundamental. A determinação dos pontos fixos é feita encontrando-se um Hamiltoniano efetivo que forneça as mesmas energias e auto-estados da diagonalização iterativa.

Nesta seção descrevemos os pontos fixos relacionados ao modelo de Anderson de duas impurezas. Estamos interessados no limite Kondo, em que

$U = -2\varepsilon_d \gg V^2/D$ , de forma que para energias  $\varepsilon \ll U$  as impurezas tendem a ter ocupação simples, assumindo assim momentos magnéticos. Os vários pontos fixos de  $\tau^2$  estão relacionados, como veremos a seguir, com o Hamiltoniano de elétrons livres  $H_{NP}^0$ . Em geral, todos os Hamiltonianos efetivos podem ser obtidos tomando-se valores especiais para  $\tilde{\Gamma}$  e  $\tilde{U}$  no Hamiltoniano original Eq. (2.1).

Inicialmente descrevemos dois pontos fixos: o ponto fixo de elétrons livres e o ponto fixo estável cujas propriedades determinam a física de baixas energias ( $N$  grande).

### 2.6.1- Ponto fixo de elétrons livres

O Hamiltoniano de elétrons livres  $H_{NP}^0$ , correspondente ao ponto fixo das iterações iniciais, é dado pela banda de condução sem a presença de impurezas

$$H_{NP}^0 = \Lambda^{\frac{N-1}{2}} \left\{ \sum_{n=0, p\sigma}^{N-1} \Lambda^{-n/2} \left[ \tilde{t}_{n,p}^z (f_{n,p\sigma}^+ f_{n+1,p\sigma} + h.c.) + \bar{\theta}_{n,p}^z f_{n,p\sigma}^- f_{n,p\sigma} \right] + \Lambda^{-N/2} \bar{\theta}_{N,p} f_{N,p}^+ f_{N,p} \right\} \quad (2.55)$$

onde  $\tilde{t}_{np}^z$  e  $\bar{\theta}_{np}^z$  são os coeficientes codiagonais e diagonais apresentados na seção (2.3). O termo  $\Lambda^{-N/2} \bar{\theta}_{N,p} f_{N,p}^+ f_{N,p}$  será desconsiderado a partir daqui visto que  $\bar{\theta}_{N,p} \ll 1$  para  $N$  grande.

Esse Hamiltoniano pode ser diagonalizado analiticamente gerando um conjunto de  $N+1$  níveis de energia de partículas independentes, assintoticamente

simétricas em relação ao nível de Fermi para  $N$  grande. Cabe ressaltar aqui as diferenças em relação ao método tradicional [5,19,37]. Além da dependência com o parâmetro  $z$ , aparecem aqui termos diagonais no Hamiltoniano preservando a assimetria partícula-buraco, como detalhado na seção (2.2). Apesar disso, o procedimento geral é semelhante ao das referências [5,19,37], onde podem ser encontrados mais detalhes.

Obtém-se o espectro de energias a partir da representação do Hamiltoniano na forma matricial,

$$H_{N,p}^0 = f^+ [\mathcal{H}_{N,p}^0]_{i,j} f \quad (2.56)$$

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

$$[\mathcal{H}_{N,p}^0]_{n,n+1} = [\mathcal{H}_{N,p}^0]_{n+1,n} = \Lambda^{\frac{N-1}{2}} \Lambda^{-\frac{n}{2}} \bar{t}_{n,p}^{z_p}, \quad (2.57)$$

$$[\mathcal{H}_{N,p}^0]_{n,n} = \Lambda^{\frac{N-1}{2}} \Lambda^{-\frac{n}{2}} \bar{\theta}_{n,p}^{z_p}, \quad (2.58)$$

com  $f^- = (f_0^-, f_1^+, \dots, f_N^+)$  o conjunto dos operadores fermiônicos.

Os autovalores da matriz  $\mathcal{H}_{N,p}^0$  são obtidos a partir da diagonalização numérica. O resultado é um conjunto de autovalores  $\{\eta_i\}$  simétricos em torno de  $\eta = 0$  para  $N \rightarrow \infty$ . Assim, diagonalizado  $\mathcal{H}_{N,p}^0$  para cada autovalor  $\eta$  existe um simétrico  $-\eta$ . Quando  $N$  é par existe um autovalor com energia zero que denotamos por  $\hat{\eta}_{0,p}$  e os outros são dados pelo conjunto  $\pm \hat{\eta}_{j,p}$  ( $j = 1, \dots, N/2$ ). Para  $N$  ímpar, denotamos os autovalores por  $\pm \eta_{j,p}$  ( $j = 1, \dots, N+1/2$ ).

O estado fundamental consiste de todos os estados com energia negativa completamente ocupados. Para subtrair a energia do estado fundamental introduz-se um operador de buraco associado às energias negativas e faz-se um ordenamento normal.

Além dos autovalores podemos encontrar a expansão dos operadores  $f_N$  em termos dos operadores de elétron ( $g$ ) e buraco ( $h$ ) que diagonalizam  $H_{N,p}^0$ . Esse é um processo padrão que consiste na inversão dos autovetores obtidos durante a diagonalização numérica. Para  $N$  par existe um operador de elétron extra  $g_{opp}$  associado a  $\hat{\eta}_{0p}$ .

Encontramos, à medida que  $N$  aumenta, que os autovalores  $\eta_{jp}$  e  $\hat{\eta}_{jp}$  de  $H_{NP}^0$  calculados numericamente para um dado  $\Lambda$  e  $z$  aproximam-se rapidamente de valores limites que serão denotados por  $\eta_{jp}^*$  e  $\hat{\eta}_{jp}^*$ , respectivamente. Esses valores, junto com os operadores  $g$  e  $h$ , definem um ponto fixo,

$$\begin{aligned} H_p^* &\equiv \lim_{N \rightarrow \infty, \text{impar}} H_{N,p}^0 \\ \hat{H}_p^* &\equiv \lim_{N \rightarrow \infty, \text{par}} H_{N,p}^0 \end{aligned} \quad p = e, o \quad (2.59)$$

Os valores limites de energias bem como as expansões dos operadores  $f_{0p}$  e  $f_{1p}$  são dados nas Tabelas (2.5) e (2.6) para  $N$  ímpar e par, respectivamente [27].

$N$ ímpar	
$H_{N,p}^0 = \sum_{j=1,p,\mu}^{(N+1)/2} \eta_{jp}^* (g_{jp\mu}^+ g_{jp\mu} + h_{jp\mu}^+ h_{jp\mu})$	(2.60)
$f_{op} = \Lambda^{-\frac{(N-1)}{4}} \sum_{j=1,p,\mu}^{(N+1)/2} (\alpha_{0jp}^{*+} g_{jp\mu} + \alpha_{0jp}^{*-} h_{jp\mu}^+)$	(2.61)
$f_{1p} = \Lambda^{-\frac{3(N-1)}{4}} \sum_{j=1,p,\mu}^{(N+1)/2} (\alpha_{1jp}^{*+} g_{jp\mu} - \alpha_{1jp}^{*-} h_{jp\mu}^+)$	(2.62)
Para $N$ grande e $\Lambda^j \gg 1$	
$\eta_{jp}^* = \Lambda^{j-z_p}$	(2.63)
$\alpha_{0jp}^{*+} = N_p \frac{\int_{\Lambda^{-\frac{N-1}{2}+j-z_p-1}}^{\Lambda^{\frac{N-1}{2}+j-z_p}} A_p(\varepsilon) d\varepsilon}{(1-\Lambda^{-1})^{-1/2} \Lambda^{-\frac{N-1}{4}+\frac{j-z_p}{2}}}$	(2.64)
$\alpha_{0jp}^{*-} = N_p \frac{\int_{-\Lambda^{-\frac{N-1}{2}+j-z_p-1}}^{-\Lambda^{\frac{N-1}{2}+j-z_p}} A_p(\varepsilon) d\varepsilon}{(1-\Lambda^{-1})^{-1/2} \Lambda^{-\frac{N-1}{4}+\frac{j-z_p}{2}}}$	(2.65)
$\varepsilon \cong \varepsilon_F \Rightarrow A_p(\varepsilon) = A_p(\varepsilon_F)$	
$\alpha_{0jp}^{*+} = \alpha_{0p}(k_F) \left( \frac{1-\Lambda^{-1}}{2} \right)^{1/2} \Lambda^{(j-z_p)/2}$	(2.66)
$\alpha_{0jp}^{*-} = \alpha_{0p}(k_F) \left( \frac{1-\Lambda^{-1}}{2} \right)^{1/2} \Lambda^{(j-z_p)/2}$	(2.67)
$\alpha_{0p}(k_F) = \left\{ \frac{2k_F R^{\Delta/D} \left[ 1 \pm \frac{\text{sen}(k_F R)}{k_F R} \right]}{2k_F R \Delta \pm \left[ \text{Si}((\Delta+1)k_F R) - \text{Si}((1-\Delta)k_F R) \right]} \right\}^{1/2}$	(2.68)

**Tabela 2.5** - Hamiltoniano do ponto fixo de elétrons livres, para  $N$  ímpar, em termos dos operadores de partícula ( $g$ ) e buraco ( $h$ ) que o diagonalizam. São listados também (i) os operadores  $f_{0p}$  e  $f_{1p}$  do Hamiltoniano original em termos dos operadores  $g$  e  $h$ , (ii) os coeficientes  $\alpha_{0jp}^{*\pm}$  e autovalor  $\eta_{jp}^*$  para  $N$  grande e  $\Lambda^j \gg 1$ , (iii) os coeficientes  $\alpha_{0jp}^{*\pm}$  próximos ao nível de Fermi.  $A_p(\varepsilon)$  é a constante de acoplamento, entre impurezas e banda de condução, dependente da energia [Eq.(2.10)].  $\Delta$  é um parâmetro de assimetria Eq.(2.15).

Observe que as Eq. (2.63), (2.66) e (2.67) são as mesmas do processo tradicional de Wilson [5] se consideramos:  $z = 1$ ,  $k = k_F$ ,  $k_F R \rightarrow \infty$ .

<b><math>N</math> par</b>	
$\hat{H}_{N,p}^0 = \sum_{j=1,p,\mu}^{N/2} \hat{\eta}_{jp}^* (g_{jp\mu}^+ g_{jp\mu} + h_{jp\mu}^+ h_{jp\mu}) + \hat{\eta}_{0p}^* g_{0p\mu}^+ g_{0p\mu} \quad (2.69)$	(2.69)
$f_{op} = \Lambda^{-\frac{(N-1)}{4}} \left[ \sum_{j=1,p,\mu}^{N/2} (\hat{\alpha}_{0jp}^{*+} g_{jp\mu} + \hat{\alpha}_{0jp}^{*-} h_{jp\mu}^+) + \hat{\alpha}_{00p}^+ g_{0p\mu} \right] \quad (2.70)$	(2.70)
$f_{1p} = \Lambda^{-\frac{3(N-1)}{4}} \sum_{j=1,p,\mu}^{N/2} (\hat{\alpha}_{1jp}^{*+} g_{jp\mu} - \hat{\alpha}_{1jp}^{*-} h_{jp\mu}^+) \quad (2.71)$	(2.71)
Para $N$ grande e $\Lambda^j \gg 1$	
$\hat{\eta}_{jp}^* = \Lambda^{j-z_p+\frac{1}{2}} \quad (2.72)$	(2.72)
$\hat{\alpha}_{0jp}^{*+} = N_p \frac{\int_{\Lambda^{-\frac{N-1}{2}+j-z_p-\frac{1}{2}}}^{\Lambda^{\frac{N-1}{2}+j-z_p+\frac{1}{2}}} A_p(\varepsilon) d\varepsilon}{(1-\Lambda^{-1})^{-\frac{1}{2}} \Lambda^{-\frac{N-1}{4}+\frac{j-z_p+\frac{1}{2}}{2}}} \quad (2.73)$	(2.73)
$\hat{\alpha}_{0jp}^{*-} = N_p \frac{\int_{-\Lambda^{\frac{N-1}{2}+j-z_p-\frac{1}{2}}}^{-\Lambda^{-\frac{N-1}{2}+j-z_p+\frac{1}{2}}} A_p(\varepsilon) d\varepsilon}{(1-\Lambda^{-1})^{-\frac{1}{2}} \Lambda^{-\frac{N-1}{4}+\frac{j-z_p+\frac{1}{2}}{2}}} \quad (2.74)$	(2.74)
$\varepsilon \cong \varepsilon_F \Rightarrow A_p(\varepsilon) = A_p(\varepsilon_F)$	
$\hat{\alpha}_{0jp}^{*+} = \alpha_{0p}(k_F) \left( \frac{1-\Lambda^{-1}}{2} \right)^{\frac{1}{2}} \Lambda^{(j-z_p+\frac{1}{2})^2} \quad (2.75)$	(2.75)
$\hat{\alpha}_{0jp}^{*-} = \alpha_{0p}(k_F) \left( \frac{1-\Lambda^{-1}}{2} \right)^{\frac{1}{2}} \Lambda^{(j-z_p+\frac{1}{2})^2} \quad (2.76)$	(2.76)
$\alpha_{0p}(k_F)$ é dado pela Eq.(2.68)	

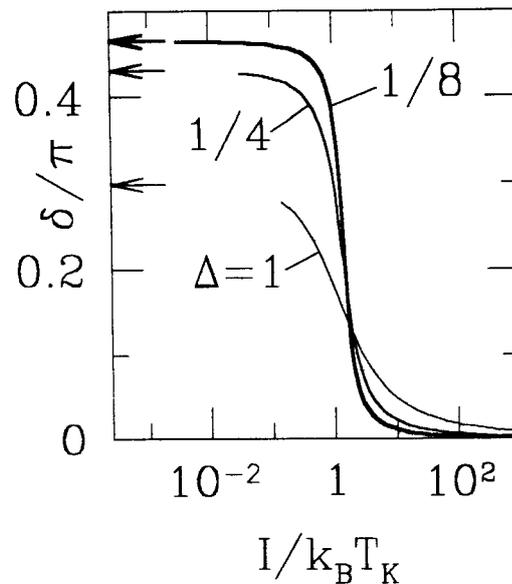
**Tabela 2.6** - Hamiltoniano do ponto fixo de elétrons livres, para  $N$  par, em termos dos operadores de partícula ( $g$ ) e buraco ( $h$ ) que o diagonalizam. São listados também (i) os operadores  $f_{0p}$  e  $f_{1p}$  do Hamiltoniano original em termos dos operadores  $g$  e  $h$ , (ii) os coeficientes  $\alpha_{0jp}^{*\pm}$  e autovalor  $\eta_{jp}^*$  para  $N$  grande e  $\Lambda^j \gg 1$  e (iii) os coeficientes  $\alpha_{0jp}^{*\pm}$  próximos ao nível de Fermi.  $A_p(\varepsilon)$  é a constante de acoplamento, entre impurezas e banda de condução, dependente da energia Eq.(2.10).

### 2.6.2 - Ponto fixo de baixas energias

O ponto fixo a baixas energias, ponto fixo de acoplamento forte, depende tanto da competição entre o efeito Kondo e o acoplamento RKKY — a razão  $I/k_B T_K$  — como do parâmetro de assimetria  $\Delta$ .

Como vimos anteriormente no limite das duas impurezas infinitamente separadas (regime Kondo)  $\delta = \pi/2$ , no regime das impurezas fortemente acopladas temos o limite ferromagnético forte com  $\delta = \pi/2$  e o limite antiferromagnético forte com  $\delta = 0$ . Para valores intermediários de acoplamento,  $\delta$  varia continuamente de 0 a  $\delta_0$  sendo que  $\delta_0$  depende da assimetria  $\Delta$ . Desta forma, o Hamiltoniano pode ir a pontos fixos intermediários, caracterizados por  $\delta$ .

Na Fig.(2.5) mostramos a defasagem da banda de condução no nível de Fermi em função de  $I/k_B T_K$  [13,27] para três valores de  $\Delta$ . Quando  $I/k_B T_K$  diminui, levando o Hamiltoniano do regime RKKY para o regime Kondo, o deslocamento de fase no nível de Fermi cresce de zero para  $\delta_0$  continuamente, levando a um comportamento tipo líquido de Fermi. Quando  $\Delta \rightarrow 0$   $\delta_0 \rightarrow \pi/2$ , o deslocamento de fase se aproxima de uma função degrau e a transição do regime RKKY antiferromagnético  $\delta = 0$  para o regime Kondo  $\delta = \pi/2$  aproxima o Hamiltoniano de um ponto fixo instável cujas propriedades são de líquido não de Fermi.



**Figura 2.5** - Defasagem  $\delta$  da banda de condução no nível de Fermi em função de  $I/k_B T_K$  para três valores de  $\Delta$  [13]. As defasagens variam continuamente de 0 para um valor máximo  $\delta_o$  indicado pelas setas. Pela regra de soma de Friedel,  $\delta_e = -\delta_o = \delta$ .

A seguir, na seção (2.6.2.a) estudamos o limite  $R \rightarrow \infty$  que corresponde a um acoplamento RKKY fraco. Na seção (2.6.2.b) analisamos os limites de interação forte entre as impurezas. A defasagem  $\delta$  é o parâmetro que caracteriza cada limite e sua determinação é de fundamental importância na determinação das propriedades físicas a baixas energias.

### 2.6.2.a — $R \rightarrow \infty$ - Impurezas Independentes

Nesse regime as impurezas estão infinitamente separadas, não ocorrendo interação entre elas. Caracterizado por  $\tilde{\Gamma} \rightarrow \infty$ , os resultados são os mesmos

encontrados por Krishna-murthy e colaboradores [19] adaptados ao contexto dos operadores pares e ímpares [37] e a dependência com a assimetria [27]. Os operadores  $c_{d\mu}$  e  $f_{o\mu}$ , que se acoplam pelo termo de hibridização  $V$ , são os únicos presentes na iteração  $N = 0$ . Quando  $\tilde{\Gamma} \rightarrow \infty$ , apenas o estado fundamental de  $H_0$  contribui para as iterações subsequentes. Assim, os graus de liberdade associados a  $c_{d\mu}$  e  $f_{o\mu}$  ficam efetivamente congelados. O Hamiltoniano remanescente, rotulado como  $H_{N,SC}$ , é

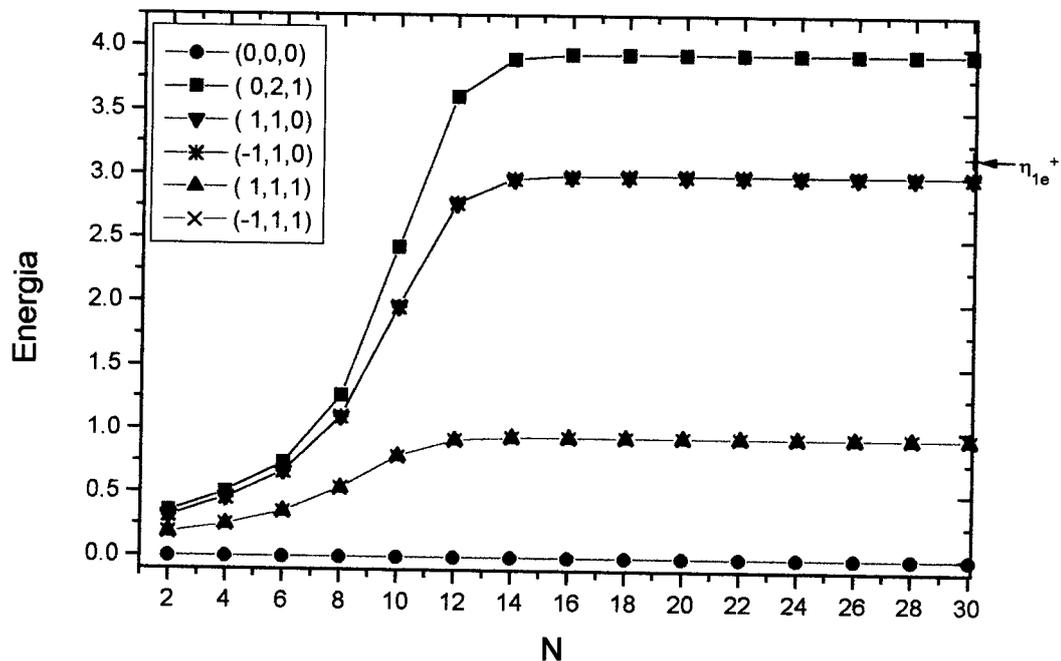
$$H_{N,SC} = \Lambda^{\frac{N-1}{2}} \left\{ \sum_{n=1, p\sigma}^{N-1} \Lambda^{-n/2} \left[ \bar{t}_{n,p}^z (f_{n,p\sigma}^- f_{n+1,p\sigma} + h.c.) + \bar{\theta}_{n,p}^z f_{n,p\sigma}^+ f_{n,p\sigma} \right] \right\} \quad (2.77)$$

Este Hamiltoniano é o mesmo que para elétrons livres Eq. (2.55) com a diferença de não conter o operador  $f_{o\mu}$ . Quando  $N \rightarrow \infty$ , os níveis de energia fluem para o ponto fixo  $\hat{H}^* = \hat{H}_e^* + \hat{H}_o^*$  para  $N$  ímpar, e  $H^* = H_e^* + H_o^*$  para  $N$  par. *Note que existe aqui uma inversão  $N = \text{par} \leftrightarrow N = \text{ímpar}$  em relação ao ponto fixo de elétrons livres em cada canal.* Assim, para  $N \rightarrow \infty$ ,

$$H_{N,SC} \rightarrow \begin{cases} H_e^* + H_o^* \equiv H_{SC}^* & N \text{ par} \quad [\text{Tab. (2.5)}] \\ \hat{H}_e^* + \hat{H}_o^* \equiv \hat{H}_{SC}^* & N \text{ ímpar} \quad [\text{Tab. (2.6)}] \end{cases} .$$

Efetivamente as impurezas, nesse regime, estão tão fortemente acopladas aos estados de condução que os graus de liberdade do sítio da impureza estão congelados, com spin total zero. A combinação dos graus de liberdade congelados e a redução nos momentos magnéticos das impurezas é denominado efeito Kondo.

Na Fig.(2.6) apresentamos um diagrama de fluxo, energia obtida da diagonalização numérica em função do número da iteração ( $N$  par), para impurezas infinitamente separadas ( regime Kondo). Para  $N > 18$  os níveis de energia alcançam o ponto fixo estável com estado fundamental  $(0,0,0)$  não degenerado. A cruz vermelha (+) destaca o valor da energia  $\eta_{1e}^{\pm}$  dos estados  $(1,1,0)$  e  $(-1,1,0)$  no ponto fixo estável conforme Eq.(2.63). Neste regime, o problema é equivalente ao de uma impureza e a banda de condução tem simetria partícula-buraco.



**Figura 2.6** - Fluxo de energia versus número de iteração ( $N$  par), para impurezas infinitamente separadas ( regime Kondo). A energia do estado fundamental é subtraída sendo a energia deste estado nula no diagrama. Para  $N > 18$  os níveis de energia alcançam o ponto fixo estável com estado fundamental  $(0,0,0)$  não degenerado. A cruz vermelha (+) destaca o valor da energia  $\eta_{1e}^{\pm}$  dos estados  $(1,1,0)$  e  $(-1,1,0)$  no ponto fixo estável conforme Eq.(2.63).

### 2.6.2.b - Impurezas Acopladas

Nesse regime as impurezas estão acopladas entre si e o tipo de interação entre elas pode ser ferro- ou antiferromagnético, dependendo da razão  $I/k_B T_K$ .

O Hamiltoniano  $H_N$  aproxima-se assintoticamente para  $N$  grande de um ponto fixo estável bem descrito por um modelo onde os elétrons de condução são espalhados por um potencial  $G$  com o Hamiltoniano dado por

$$H_{Np}(\tilde{G}) = \Lambda^{\frac{N-1}{2}} \left\{ \sum_{n=1, p\sigma}^{N-1} \Lambda^{-n/2} \left[ \bar{t}_{n,p}^z (f_{n,p\sigma}^+ f_{n+1,p\sigma} + h.c.) + \bar{\theta}_{n,p}^z f_{n,p\sigma}^+ f_{n,p\sigma} \right] + \tilde{G} f_{1p}^+ f_{1p} \right\}, \quad (2.78)$$

onde  $\tilde{G} = \frac{4}{(1 + \Lambda^{-1})D} G$ , é avaliado numericamente conforme explicado na pág. 65.

Observe que  $H_{Np}(\tilde{G}) = H_{Np}^0 + \Lambda^{\frac{N-1}{2}} \tilde{G} f_{1p}^+ f_{1p}$ , onde  $H_{Np}^0$  é o Hamiltoniano de elétrons livres visto anteriormente com a mesma inversão  $N = \text{par} \leftrightarrow N = \text{ímpar}$  descrito na seção (2.6.2.a). Da mesma maneira que  $H_{Np}^0$ ,  $H_{Np}(\tilde{G})$  pode ser diagonalizado analiticamente [27].

Os resultados para os autovalores e a expansão de  $f_{1p}$  na nova base são dados na Tab.(2.7) e na Tab.(2.8) para  $N$  ímpar e par, respectivamente (note que, como  $f_{0p}$  foi congelado,  $f_{1p}$  assumiu o papel que era de  $f_{0p}$  nas tabelas).

<b><math>N</math> ímpar</b>	
$\hat{H}_{N,p}^0 = \sum_{j=1,p,\mu}^{(N+1)/2} (\hat{\eta}_{jp}^{*+} g_{jp\mu}^+ g_{jp\mu} + \hat{\eta}_{jp}^{*-} h_{jp\mu}^+ h_{jp\mu})$	(2.79)
$f_{1p} = \Lambda^{-\frac{(N-1)}{4}} \sum_{j=1,p,\mu}^{(N+1)/2} (\hat{\alpha}_{1jp}^{*+} g_{jp\mu} + \hat{\alpha}_{1jp}^{*-} h_{jp\mu}^+)$	(2.80)
Para $N$ grande e $\Lambda^j \gg 1$	
$\hat{\eta}_{jp}^{*\pm} = \Lambda^{j-z_p \pm \delta/\pi}$	(2.81)
$\hat{\alpha}_{1jp}^{*\pm} = \alpha_{0p}(k_F) \left( \frac{1-\Lambda^{-1}}{2} \right)^{1/2} (\hat{\eta}_{jp}^{*\pm})^{1/2} \cos \delta$	(2.82)
$\alpha_{0p}(k_F)$ é dado pela Eq. (2.68)	

**Tabela 2.7** - Hamiltoniano do ponto fixo com potencial de espalhamento, para  $N$  ímpar, em termos dos operadores de partícula ( $g$ ) e buraco ( $h$ ) que o diagonalizam. São listados o operador  $f_{1p}$  do Hamiltoniano original em termos dos operadores  $g$  e  $h$ , os coeficientes  $\alpha_{1jp}^{*\pm}$  e os autovalores  $\eta_{jp}^*$  para  $N$  grande e  $\Lambda^j \gg 1$ .

<b><math>N</math> par</b>	
$H_{N,p}^0 = \sum_{j=1,p,\mu}^{N/2} (\eta_{jp}^{*+} g_{jp\mu}^+ g_{jp\mu} + \eta_{jp}^{*-} h_{jp\mu}^+ h_{jp\mu}) + \eta_{1p}^* g_{1p\mu}^+ g_{1p\mu}$	(2.83)
$f_{1p} = \Lambda^{-\frac{(N-1)}{4}} \left[ \sum_{j=1,p,\mu}^{N/2} (\alpha_{1jp}^{*+} g_{jp\mu} + \alpha_{1jp}^{*-} h_{jp\mu}^+) + \alpha_{1p}^{*+} g_{1p\mu} \right]$	(2.84)
Para $N$ grande e $\Lambda^j \gg 1$	
$\eta_{jp}^{*\pm} = \Lambda^{j-z_p + 1/2 \pm \delta/\pi}$	(2.85)
$\alpha_{1jp}^{*\pm} = \alpha_{0p}(k_F) \left( \frac{1-\Lambda^{-1}}{2} \right)^{1/2} (\eta_{jp}^{*\pm})^{1/2} \cos \delta$	(2.86)
com $\alpha_{0p}(k_F)$ dado pela Eq. (2.68)	

**Tabela 2.8** - Hamiltoniano do ponto fixo com potencial de espalhamento, para  $N$  par, em termos dos operadores de partícula ( $g$ ) e buraco ( $h$ ) que o diagonalizam. São listados o operador  $f_{1p}$  do Hamiltoniano original em termos dos operadores  $g$  e  $h$ , os coeficientes  $\alpha_{1jp}^{*\pm}$  e os autovalores  $\eta_{jp}^*$  para  $N$  grande e  $\Lambda^j \gg 1$ .

Nestas expressões,  $\delta$  representa a defasagem sofrida pela banda de condução devido ao potencial de espalhamento  $\tilde{G}$ . Como já citamos, a defasagem é um dos parâmetros mais relevantes no entendimento das propriedades a baixas energias, e permite calcular a densidade espectral para  $\varepsilon = 0$ , como apresentaremos no capítulo seguinte [Cap. III].

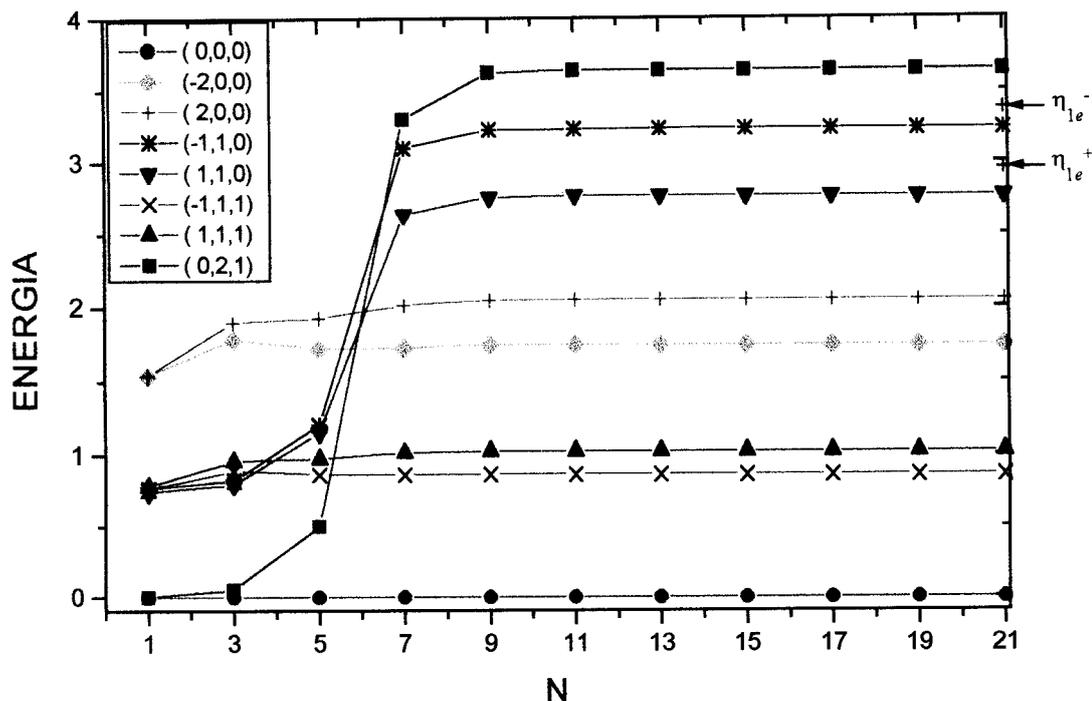
O valor de  $\tilde{G}$  associado ao nosso problema depende dos parâmetros iniciais do modelo. Na prática, avaliamos  $\tilde{G}$  da seguinte maneira: analisando as energias de muitos corpos obtida na diagonalização iterativa, para  $N$  ímpar, por exemplo, observamos que ela pode ser construída por níveis de energia dados pela Eq.(2.81), com valores apropriados das defasagens para o canal par ( $\delta_e$ ) e para o canal ímpar ( $\delta_o$ ). Comparando os resultados numéricos das energias de muitos corpos do processo iterativo, no limite de  $N$  grande, com as energias construídas a partir dos níveis de partículas independentes do ponto fixo podemos encontrar as defasagens  $\delta_e$  e  $\delta_o$ .

Determinadas as defasagens podemos encontrar o valor do espalhamento  $\tilde{G}$ , que em princípio pode ser diferente para cada uma das bandas. Diagonalizando sucessivamente o Hamiltoniano  $H_{Np}(\tilde{G})$  para diferentes valores de  $\tilde{G}$ , encontramos um valor que fornece as defasagens corretas.

Diagonalizando o Hamiltoniano  $H_{Np}(\tilde{G})$  para o valor encontrado de  $\tilde{G}$  podemos determinar os coeficientes  $\alpha_{np}^+$  da expansão dos  $f_{np}$ . Esse cálculo é fundamental pois permite determinar esses coeficientes que serão usados no cálculo da densidade espectral para  $\varepsilon = 0$ , como veremos adiante.

Nas Fig.(2.7) e (2.8) apresentamos diagramas de fluxo, energia obtidas numericamente em função da iteração, para os casos antiferromagnético ( $k_F R = \pi$ ) e ferromagnético ( $k_F R = \pi/2$ ), respectivamente. São apresentados apenas alguns níveis de mais baixa energia rotulados por seus números quânticos  $(Q, 2S, p)$ . Nos dois diagramas, para as primeiras iterações, os níveis de energia são característicos de impurezas livres. À medida que  $N$  aumenta, os estados  $(0, 2, 1)$  e  $(0, 0, 0)$  deixam de ser degenerados indicando maior acoplamento entre as impurezas.

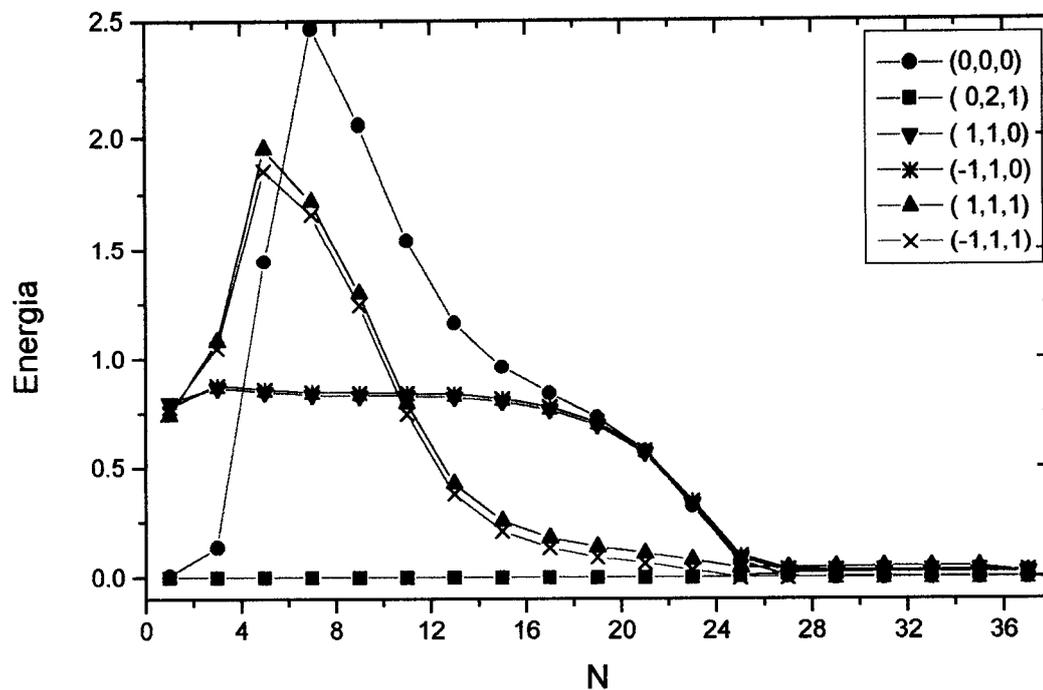
No caso de acoplamento antiferromagnético, Fig.(2.7), o estado fundamental fica sendo o singlete  $[(0, 0, 0)]$ . Para  $N \approx 9$  os níveis de energia alcançam o ponto fixo estável com estado fundamental não degenerado. A diferença entre  $(0, 0, 0)$  e  $(0, 2, 1)$ , para  $N$  grande, indica que as impurezas permanecem acopladas. São indicados os valores de  $\eta_{he}^+$  (energia de uma partícula) e  $\eta_{he}^-$  (energia de um buraco) que neste caso são diferentes, refletindo a assimetria partícula-buraco.



**Figura 2.7** - Fluxo de energia versus número de iteração ( $N$  ímpar), para acoplamento entre as impurezas antiferromagnético ( $J = 0.1$ ,  $k_p R = \pi$ ). Apenas alguns estados de mais baixa energia são apresentados, rotulados por seus números quânticos ( $q, 2s, p$ ). A energia do estado fundamental é subtraída sendo a energia deste estado nula no diagrama. No início os níveis de energia são característicos de impurezas livres, a medida que aumenta  $N$ , os estados  $(0,2,1)$  e  $(0,0,0)$  deixam de ser degenerados e aumenta a diferença entre eles indicando um acoplamento maior entre as impurezas (acoplamento antiferromagnético — estado fundamental singlete). Para  $N > 9$  os níveis de energia alcançam o ponto fixo estável com estado fundamental  $(0,0,0)$  não degenerado. As cruzes vermelhas (+) destacam a assimetria partícula-buraco.  $\eta_{1e}^+$  é o valor da energia do estado  $(1,1,0)$  e  $\eta_{1e}^-$  é o valor da energia do estado  $(-1,1,0)$  no ponto fixo estável calculadas usando a Eq.(2.81).

Quando o acoplamento é ferromagnético, Fig.(2.8), o estado fundamental é tripleto  $[(0,2,1)]$ . Neste caso ocorre o efeito Kondo de dois estágios, que é bem caracterizado na figura. Os estados da banda par, se acoplam com o tripleto no processo de redução do spin de  $S = 1 \rightarrow 1/2$  e formam um patamar caracterizando um ponto fixo estável por volta de  $N = 17$ . Enquanto isso nenhuma mudança nos estados com paridade ímpar é observada. Em seguida, os estados da banda ímpar

reduzem o spin de  $S = 1/2 \rightarrow 0$ . Para  $N \approx 30$  todos os níveis de energia alcançam o ponto fixo estável.



**Figura 2.8** - Fluxo de energia versus número de iteração ( $N$  ímpar), para acoplamento ferromagnético entre as impurezas ( $J = 0.1$ ,  $k_p R = \pi/2$ ). Apenas alguns estados de mais baixa energia são apresentados, rotulados por seus números quânticos ( $q$ ,  $2s$ ,  $p$ ). A energia do estado fundamental é subtraída sendo a energia deste estado nula no diagrama. No início os níveis de energia são característicos de impurezas livres, a medida que aumenta  $N$  ( $N \approx 4$ ), os estados  $(0,2,1)$  e  $(0,0,0)$  deixam de ser degenerados e aumenta a diferença entre eles indicando um acoplamento maior entre as impurezas (acoplamento ferromagnético — estado fundamental tripleto). A banda de condução par reduz o spin do tripleto de  $S = 1 \rightarrow 1/2$  e forma um patamar caracterizando um ponto fixo estável por volta de  $N = 17$ . Em sequência, os estados da banda ímpar reduzem o spin de  $S = 1/2 \rightarrow 0$ . Para  $N \approx 30$  todos os níveis de energia alcançam o ponto fixo estável.

## CAPÍTULO III

### DENSIDADE ESPECTRAL

#### 3.1 - Características Gerais

A densidade espectral, experimentalmente, pode ser medida por meio de técnicas como Espectroscopia de Fotoemissão de Raio-X (XPS) e Espectroscopia Isocromática de Bremstrahlung (BIS). Para facilitar a descrição daremos mais atenção ao processo de fotoemissão (XPS), mas o raciocínio é semelhante para Bremstrahlung (BIS). Nosso cálculo engloba tanto a densidade espectral para excitações do tipo partícula ( $\varepsilon > 0$ ) como do tipo buraco ( $\varepsilon < 0$ ).

Experiências de XPS — versões aprimoradas da observação do efeito fotoelétrico — consistem em extrair com raio-X de energia  $\hbar\omega$  um elétron de um orbital atômico profundo. Um detetor mede a energia cinética  $E_c$  e a corrente fotoeletrônica  $\sigma$  dos elétrons emitidos. Pelo princípio da conservação da energia, o raio-X cede  $\varepsilon = \hbar\omega - E_c$  para o material, que fica em um estado excitado. Com  $\sigma$  em função de  $\varepsilon$  traça-se o espectro de fotoemissão, intimamente relacionado com a densidade de estados do orbital pesquisado. Esse espectro serve como uma impressão digital para identificar o estado inicial.

Em nosso modelo, considerando que em XPS os elétrons são arrancados de níveis localizados  $|d_i\rangle$  — onde  $i = e$  ou  $o$  é a combinação par ou ímpar dos níveis  $d_1$  e  $d_2$  das impurezas que formam uma base completa para os estados da impureza — e detectados em um nível de energia  $E_k$  e momentum  $\vec{k}$  no contínuo, escrevemos o Hamiltoniano de interação da matéria com a radiação, em notação de segunda quantização, como

$$H_X(t) = \sum_{i=e,o} \left( \langle \vec{k} | W | d_i \rangle c_{\vec{k}}^+ c_{d_i} + h.c. \right), \quad (3.1)$$

onde  $\langle \vec{k} | W | d_i \rangle = \langle \vec{k} | -\frac{e}{mc} \vec{p} \cdot \vec{A}(\vec{r}, t) | d_i \rangle$  é o elemento de matriz de dipolo de radiação X e,  $\vec{A}(\vec{r}, t) = (c/\omega) \vec{E}_0 \cos(\vec{q} \cdot \vec{r} - \omega t)$  é, no gauge de Coulomb, o potencial vetor na posição do elétron de momentum  $\vec{p}$  espalhado pelo raio-X. Podemos reescrever a Eq. (3.1) como

$$H_X(t) = \left( H_X e^{-i\omega t} + h.c. \right), \quad (3.2)$$

onde

$$H_X = \sum_{i=e,o} \langle \vec{k} | W | d_i \rangle c_{\vec{k}}^+ c_{d_i}. \quad (3.3)$$

A princípio, para uma escolha arbitrária de energia,  $H_X$  depende dos dois termos da soma ( $i = e, o$ ). Em nosso trabalho calculamos as componentes par e ímpar separadamente. Assim, trocamos a soma da Eq.(3.3) pelo índice  $p (= e, o)$  em  $H_X$ , isto é  $H_X \rightarrow H_{Xp}$ . Uma vez que  $1/\sqrt{2} (c_{de} \pm c_{do}) = (1/N) \sum_j c_{d_j} e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}_j}$  com

$k = n\pi/a$   $n = 0,1$ , isto corresponde, experimentalmente, detectar elétrons com momentum bem definido,  $k = 0$  e  $k = \pi/a$ .

A regra de ouro de Fermi, para calcular a probabilidade de transição de uma configuração  $d^n$  para outra  $d^{n-1}$  (ou  $d^{n+1}$ ), é dada por

$$w(\varepsilon) = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_f \left| \langle f | H_X | I \rangle \right|^2 \delta(E_f - E_I \mp \varepsilon) \quad (3.4)$$

onde o sinal  $\mp$  na função delta refere-se ao processo de absorção de elétrons (-) e ao processo de emissão de elétrons(+).

Substituindo  $H_{Xp}$ , Eq.(3.3), na Eq.(3.4) temos

$$\begin{cases} w_p(\varepsilon) = \gamma_p \sum_f \left| \langle f | c_{dp} | \Omega \rangle \right|^2 \delta(E_f - E_\Omega - \varepsilon) & (\varepsilon < 0) \\ w_p(\varepsilon) = \gamma_p \sum_f \left| \langle f | c_{dp}^+ | \Omega \rangle \right|^2 \delta(E_f - E_\Omega + \varepsilon) & (\varepsilon > 0) \end{cases} \quad (3.5)$$

onde  $|\Omega\rangle$  é o estado fundamental caracterizado por  $a_j^+|\Omega\rangle = 0$  para  $\varepsilon < 0$  (XPS) e  $b_j|\Omega\rangle = 0$  para  $\varepsilon > 0$  (BIS);  $a_j$  e  $b_j$  são operadores de destruição de partículas e buracos, respectivamente. Os estados finais  $|f\rangle$  são definidos como  $a_j^+|\Omega\rangle$  para  $\varepsilon < 0$  e  $b_j|\Omega\rangle$  para  $\varepsilon > 0$ .  $\gamma_p = 2\pi/\hbar \left| \langle \vec{k} | W | d_i \rangle \right|^2$ .

Os termos que aparecem no somatório da Eq.(3.5) definem a densidade espectral [42], isto é

$$\begin{cases} \rho_p(\varepsilon) = \sum_f \left| \langle f | c_{dp} | \Omega \rangle \right|^2 \delta(E_f - E_\Omega - \varepsilon) & (\varepsilon < 0) \\ \rho_p(\varepsilon) = \sum_f \left| \langle f | c_{dp}^+ | \Omega \rangle \right|^2 \delta(E_f - E_\Omega + \varepsilon) & (\varepsilon > 0) \end{cases} \quad (3.6)$$

No nosso cálculo, a discretização da banda de condução faz as energias que aparecem na Eq.(3.6) serem discretas; conseqüentemente, os espectros gerados são também discretos, com funções deltas nas energias de excitações. Se pudéssemos trabalhar no limite  $\Lambda \rightarrow 1$  reaveríamos o contínuo. O custo computacional de se tomar esse limite é, no entanto, proibitivo. Usamos um procedimento alternativo onde variando o parâmetro  $z$ , de discretização da banda, podemos gerar todos os estados em torno de uma dada excitação, simulando o contínuo. A integral em  $z$  das probabilidades de transições correspondentes a esses estados define as densidades espectrais par e ímpar que queremos calcular, isto é,

$$\rho_p(\varepsilon) = \int_{z_0}^{z_0+1} \rho_p^z(\varepsilon) dz, \quad (3.7)$$

onde as densidades  $\rho_p^z(\varepsilon)$  são as dadas na Eq.(3.6).

Do intervalo de integração exige-se apenas que seja unitário, ( $z_0 < z < z_0 + 1$ ), uma vez que ao crescer  $z$  da unidade retornamos à mesma base, exceto pelos dois primeiros estados [Fig.(2.1.b)] os quais só são importantes quando se está interessado em energias da ordem da largura da banda. Não é esse o nosso caso.

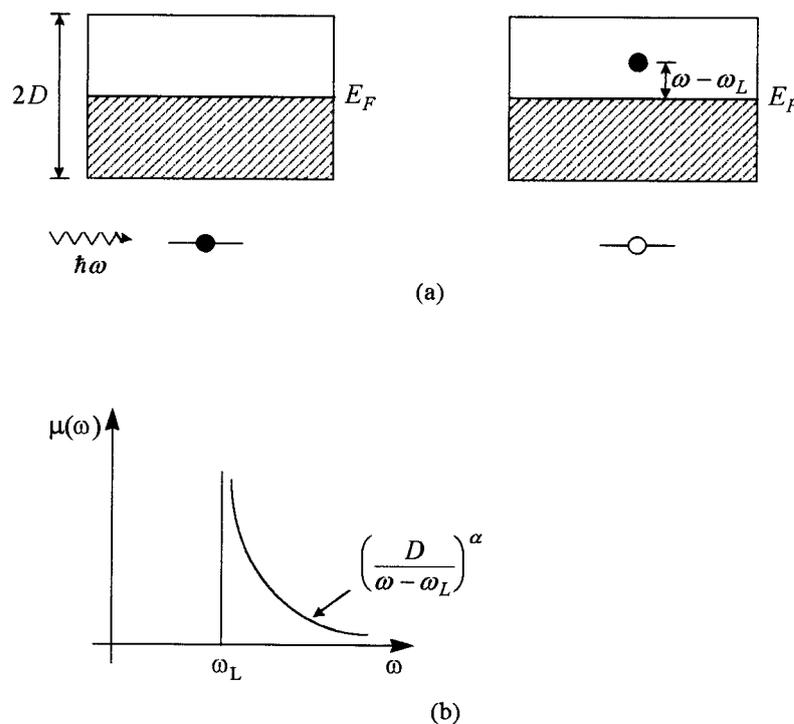
O Apêndice II descreve o cálculo numérico das densidades espectrais a partir das Eqs.(3.6) e (3.7). Na próxima seção apresentamos uma discussão qualitativa dos resultados esperados para as densidades espectrais. Antes, porém, é instrutivo abordar alguns dos principais resultados teóricos relativos a espectroscopia de níveis profundos.

Em experiência de absorção de raio-X, Fig.(3.1.a), a frequência mínima capaz de excitar o elétron localizado ao nível de Fermi é denominada frequência limiar  $\omega_L$ .

Em 1967, Mahan [44] mostrou — usando teoria de perturbação — que, se um elétron for subitamente excitado para a banda de condução pela ação de raio-X, o buraco localizado (cuja vida média ele supôs infinita) é blindado pela nuvem eletrônica. O coeficiente de absorção de raio-X tem uma singularidade na frequência limiar, Fig.(3.1.b), seguindo a lei de potência dada por

$$\mu(\omega) \sim \left( \frac{D}{\omega - \omega_L} \right)^{\alpha_i} \quad (3.8)$$

onde  $\alpha_i = 2\delta_i/\pi$  e  $\delta_i = \delta_f - \delta_i = -\pi\rho G$  a defasagem. No nosso caso,  $l = 0$  e daqui para frente omitiremos esse índice.



**Figura 3.1** - Representação esquemática de um experimento de absorção de raio-X. Em (a) a absorção de raio-X com frequência  $\omega$  excita um elétron profundo para a banda de condução.  $\omega_L$  é a frequência limiar de raio-X necessária para ocorrer fotoemissão. Em (b) aparece a representação de um espectro típico de absorção de raio-X.

Ainda em 1967, Anderson [45] deu uma explicação para a singularidade, mostrando que a projeção do estado inicial sobre o final tende a zero no limite termodinâmico, diminuindo com o número de elétrons segundo  $N^{-\alpha}$  com  $\alpha = (\delta/\pi)^2$ .

Em 1969, Nozières e De Dominicis [46] apresentaram a solução exata do problema de absorção de raio-X. Mostraram que o coeficiente de absorção tem a forma dada por Mahan mas com expoente

$$\alpha = 2 \frac{\delta}{\pi} - g \left( \frac{\delta}{\pi} \right)^2. \quad (3.9)$$

O primeiro termo do lado direito corresponde ao de Mahan, o segundo ao da ortogonalidade de Anderson e  $g$  é o número de canais de condução. A Eq.(3.9) descreve nossos resultados numéricos como será apresentado no Cap.IV.

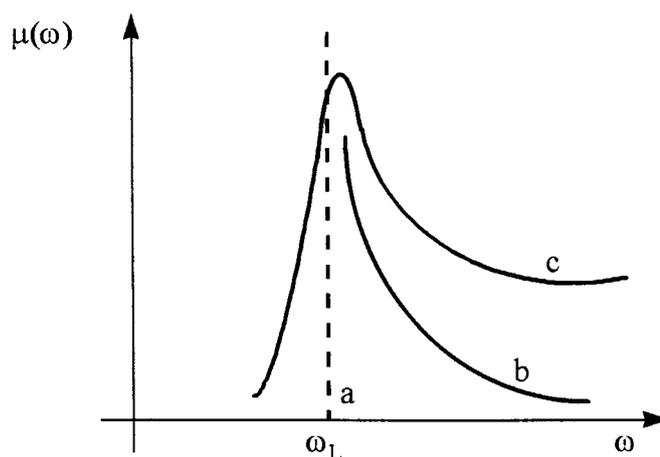
Uma extensão do trabalho de Nozières e De Dominicis para fotoemissão (XPS) foi feita por Doniach e Sunjic [47], em 1970. Doniach e Sunjic calcularam a corrente fotoemitida e mostraram ( no limite  $\omega \rightarrow \omega_L$  ) que ela segue a mesma lei de potência de Nozières e De Dominicis com

$$\alpha = 1 - g \left( \frac{\delta}{\pi} \right)^2. \quad (3.10)$$

Essa expressão difere da Eq. (3.9) porque o elétron profundo é ejetado para fora da amostra, e não para a banda de condução. O segundo termo no lado direito dessa equação é reflexo da catástrofe de Anderson [45].

A Fig.(3.2) mostra um espectro típico de fotoemissão de um nível localizado. A curva (a) é o espectro na ausência de acoplamento Coulombiano do

buraco com a banda de condução. Levando em conta o potencial Coulombiano o espectro se torna o da curva (b). Considerando que um elétron da banda pode decair não radiativamente para o buraco localizado, excitando um outro elétron de condução, que delimita a vida média do buraco, o espectro alarga e amortece a singularidade, curva (c).



**Figura 3.2** - Representação esquemática dos resultados obtidos por Doniach e Sunjic para um espectro XPS em metais. Em (a) o espectro quando não existe acoplamento com a banda de condução, apenas uma frequência é capaz de fotoemitir. Em (b) o espectro quando existe acoplamento com a banda de condução, qualquer frequência maior que a limiar pode fotoemitir o elétron. Em (c) o alargamento da singularidade próximo ao limiar devido o tempo de vida finito do buraco profundo.

Todos os trabalhos citados acima contribuíram para a interpretação de processos de absorção de raio-X e tiveram sucesso na comparação com dados experimentais.

## 3.2 -Discussão Qualitativa — Regimes Assintóticos

Nossos resultados para as densidades espectrais são apresentados no Cap. IV. Nesta seção faremos uma discussão qualitativa nos três regimes de acoplamento forte, regime Kondo, ferro- e antiferromagnético.

Em todo nosso trabalho consideramos  $U = -2\varepsilon_d \gg \Gamma$ , de forma que para energias  $\varepsilon \ll U$  as impurezas tendem a ter ocupação simples, assumindo momentos magnéticos. Nesse limite, como no caso de uma impureza (Cap. I), os modelos de Anderson e de Kondo de duas impurezas são equivalentes. A associação entre os modelos simplifica as interpretações; onde possível, preferiremos discutir a física do modelo de Kondo.

Enfatizamos o caso da ocorrência de fotoemissão, por ser mais ilustrativo, mas o mesmo raciocínio pode ser aplicado ao processo de absorção. As configurações da impureza serão representadas por  $d^0$  (vazia),  $d^1$  (ocupada com um elétron) e  $d^2$  (duplamente ocupada).

### 3.2.1 - Regime Kondo

O regime Kondo se caracteriza por uma separação tão grande entre as impurezas que o acoplamento entre elas é desprezível, reduzindo o problema a dois modelos de uma impureza.

Cada impureza se acopla separadamente com os elétrons de condução e as densidades espectrais par e ímpar são iguais à calculada para o modelo de uma impureza. Resultados para o modelo de uma impureza, obtidos por Frota e Oliveira [21], foram apresentados no Cap. I. A seguir detalhamos o caso de nosso interesse, o regime Kondo [Fig.(1.4.c)].

Para energias  $\varepsilon \gg \Gamma$  o estado inicial é a configuração  $d^1$  e, para o caso de fotoemissão, o estado final é a configuração vazia  $d^0$ . Quando o acoplamento com a banda de condução é nulo ( $\Gamma = 0$ ), a transição  $d^1 \rightarrow d^0$  tem um máximo em  $-U/2$ . Um pico simétrico a este ocorre para energias positivas, decorrente da transição  $d^1 \rightarrow d^2$ . Mostramos essa transição no detalhe da Fig.(3.3). Quando  $\Gamma \neq 0$ , a função delta se alarga. Como o estado final dessa transição possui dois canais de decaimento ( $d^0 \rightarrow d^\uparrow$  e  $d^0 \rightarrow d^\downarrow$ ) a meia largura desta ressonância, centrada em  $|U/2|$ , é  $2\Gamma$ ; veja a Fig.(3.3). Esse pico aparece em todos os regimes que discutiremos mas não será observado em nossos espectros, pois supomos  $U$  muito grande ( $U = 100D$ ).

Diminuindo  $\varepsilon$ ,  $\Gamma$  torna-se relevante e para  $\varepsilon \approx k_B T_K = \Gamma_K$  aparece a ressonância de Kondo. Com isso, o spin da impureza forma um estado singleto (fundamental) e um estado tripleto (de energia  $k_B T_K$  acima do estado fundamental) com os spins da banda de condução. Devido ao forte acoplamento os níveis de energia são deslocados e no nível de Fermi a defasagem é  $\pi/2$ . Mesmo sem energia suficiente para acessar o estado tripleto, transições virtuais entre as configurações  $d^1$ ,  $d^0$  e  $d^2$  permitem fotoemissão (ou absorção) a partir desse estado fundamental

( $\delta_i = \pi/2$ ) e o estado final será uma combinação da banda de condução, do tripleto e do buraco deixado pelo elétron arrancado ( $\delta_f = 0$ ). Segundo Nozières e De Dominicis, para  $\varepsilon \sim \Gamma_K$  a densidade espectral dada pelas Eqs.(3.8) e (3.9) é

$$\rho(\varepsilon) = \left(\frac{D}{\varepsilon}\right)^{2\frac{\delta}{\pi} - g\left(\frac{\delta}{\pi}\right)^2}. \quad (3.11)$$

Neste caso,  $g = 2$  e  $\delta = \delta_f - \delta_i = -\pi/2$ . Note-se que para esses parâmetros, o coeficiente de Doniach e Sunjic é igual ao de Nozières e De Dominicis.

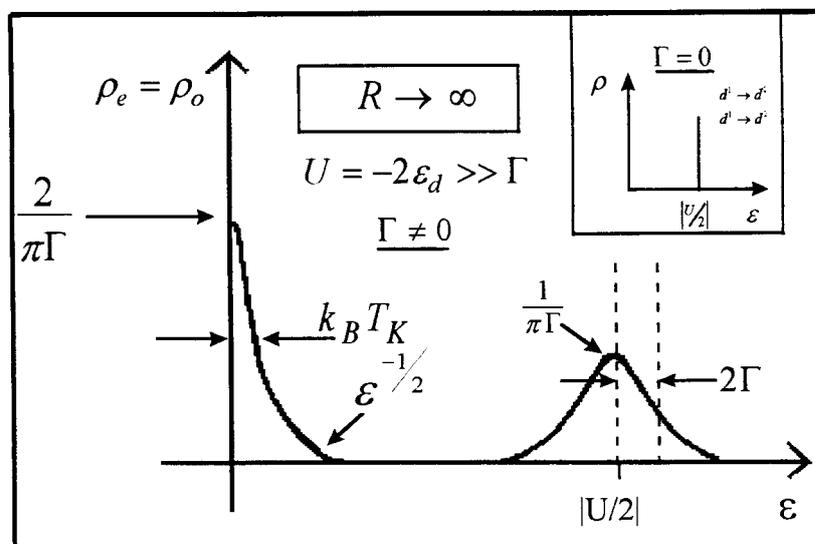
Assim para energias muito maiores que  $\Gamma_K$ , o Hamiltoniano está próximo do ponto fixo de momento local e as duas configurações  $d^1$  coexistem com uma banda de condução livre,  $\delta = 0$ . Para  $\varepsilon < \Gamma_K$   $\rho(\varepsilon)$  é proporcional a  $(\varepsilon/D)^{-1.2}$ . Para  $\varepsilon \rightarrow 0$  a densidade espectral tem o valor previsto por Langreth [Eq.(1.5)]. O pico centrado no nível de Fermi é conhecido como ressonância de Kondo.

Frota e Oliveira [20,21] derivaram uma função fenomenológica [Eq.(1.9)], a partir da lei de Doniach-Sunjic, para a forma da ressonância Kondo. A energia  $\varepsilon$  na Eq.(3.11) é substituída por uma energia a qual se agrega uma incerteza,  $\varepsilon \rightarrow \varepsilon + i\Gamma_K$ . Os resultados numéricos encontrados concordam muito bem com essa equação.

Outra característica importante a observar é a área abaixo da curva da densidade espectral. Pela regra da soma [43] a área abaixo da curva é igual ao número de ocupação do estado fundamental, neste caso igual à unidade.

A Fig.(3.3) é um esboço qualitativo da discussão apresentada acima. Não deve ser levada em conta a escala da figura, apenas se deve dar atenção a forma das

curvas e aos valores para os quais apontam. A mesma observação vale para as Figs.(3.6) e (3.8).



**Figura 3.3** - Esboço da densidade espectral em função da energia para o modelo de Anderson de duas impurezas com  $R \rightarrow \infty$ . Neste regime as densidades espectrais par e ímpar são iguais à calculada para o modelo de uma impureza [20]. Com  $U = -2\varepsilon_d \gg \Gamma$ , as impurezas tendem a ter ocupação simples e momento magnético. Para  $\varepsilon \gg \Gamma$  o estado inicial possui 1 elétron ( $d^1$ ) e no caso de fotoemissão o estado final será a configuração vazia ( $d^0$ ). Para  $\Gamma = 0$  (como indicado no detalhe) ocorre um pico em  $U/2$ . Para  $\Gamma \neq 0$  há um alargamento desse pico (meia largura  $2\Gamma$ ). Diminuindo  $\varepsilon$ ,  $\Gamma$  torna-se relevante e ocorre o efeito Kondo, caracterizado pela ressonância no nível de Fermi.

### 3.2.2 - Regime Antiferromagnético

Descrito pela desigualdade  $I \gg k_B T_K$  o regime antiferromagnético leva, a energias próximas de  $I$ , à formação de um estado singleto entre as impurezas. No

caso antiferromagnético forte, as impurezas acopladas não afetam muito os elétrons de condução e a defasagem no nível de Fermi é próxima de zero.

Neste regime observamos diferentes densidades espectrais em função da paridade (par ou ímpar) e em função do tipo de excitação (partícula ou buraco).

Para  $\varepsilon \gg I$  a densidade espectral não pode se distinguir da encontrada no limite  $k_F R \rightarrow \infty$ . Diminuindo  $\varepsilon$ , para  $\varepsilon \approx I$  as impurezas se acoplam antiferromagneticamente formando um singlete, separado de um tripleto pela energia  $I$ . Excitações entre esses dois estados geram um pico para energias próximas a  $I$ . Para melhor compreensão é útil recorrer ao modelo de Kondo de duas impurezas, a que se reduz o modelo de Anderson quando  $\varepsilon \ll U$ .

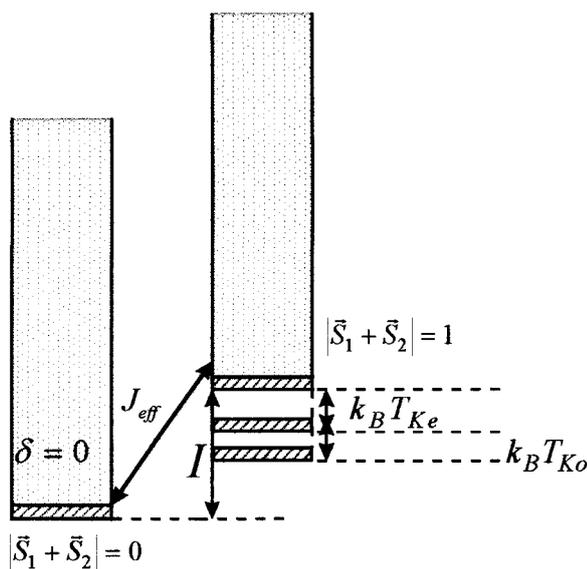
O Hamiltoniano de Kondo de duas impurezas pode ser escrito como [13]

$$H = H_0 + \frac{1}{2}(\vec{S}_1 + \vec{S}_2) \cdot \sum_{\mu\nu} (J_e f_{0\mu e}^+ \vec{\sigma}_{\mu\nu} f_{0\nu e} + J_o f_{0\mu o}^+ \vec{\sigma}_{\mu\nu} f_{0\nu o}) + \frac{1}{2}(\vec{S}_1 - \vec{S}_2) \cdot \sum_{\mu\nu} (J_{eo} f_{0\mu e}^+ \vec{\sigma}_{\mu\nu} f_{0\nu o} + h.c.), \quad (3.12)$$

onde  $\vec{S}_1$  e  $\vec{S}_2$  são os operadores de spin da impureza 1 e 2, respectivamente.  $H_0$  é o termo referente a banda de condução e  $f_0$  é o mesmo que definimos no Cap.II.

O termo proporcional a  $\vec{S}_1 + \vec{S}_2$  preserva o spin total das impurezas, não mistura os canais de condução e gera um acoplamento diferente para cada canal. O termo proporcional a  $\vec{S}_1 - \vec{S}_2$  não comuta com o spin total das impurezas, mistura os estados singlete e tripleto das impurezas e permite transições eletrônicas entre os canais par e ímpar. Qualitativamente representamos na Fig.(3.4) o estado fundamental do regime antiferromagnético. A baixas energias o estado fundamental

singleto ( $S = 0$ ) é separado do estado excitado ( $S = 1$ ) por uma energia  $I$  e estes subespaços são interligados por uma interação proporcional a uma constante de acoplamento  $J_{eff}$ .



**Figura 3.4** - Representação esquemática do estado fundamental do regime antiferromagnético. A diferença de energia entre o estado fundamental singleto ( $\delta_r = 0$ ) e o tripleto é dada pela interação RKKY  $I$ . Para  $J \neq 0$  a energia no subespaço tripleto se reduz de  $k_B T_{Ke}$  na banda par e  $k_B T_{Ko}$  na banda ímpar. Os dois subespaços se misturam pelo acoplamento efetivo  $J_{eff}$ .

Como visto na seção (3.1), Fig.(3.2), esperamos que para  $J_{eff} = 0$  a função delta apresente um pico para  $\varepsilon = I$ . Com  $J_{eff} \neq 0$  a função delta alarga e, para  $\varepsilon > I$  segue a lei de potência de Nozières e De Dominicis com coeficiente  $\alpha$  dado pela Eq.(3.9). Para  $\varepsilon < I$ , falta energia para transições reais, no entanto transições virtuais são possíveis. Cálculos rigorosos do grupo de renormalização, que mostraremos na seção (3.3.2), revelam que nessa região um Hamiltoniano efetivo é capaz de descrever a densidade espectral. Neste caso, tal Hamiltoniano é formado pela Eq.(3.12) mais o termo  $\omega_p(f_{0p\mu}^+ + h.c.)$  onde os coeficientes  $\omega_p$  são

infinitesimais e podem ser tratados perturbativamente. Podemos, então, escrever o Hamiltoniano efetivo como

$$\begin{aligned}
 H_{eff} = H_0 + \frac{1}{2}(\vec{S}_1 + \vec{S}_2) \cdot \sum_{\mu\nu} (J_e f_{0\mu e}^+ \vec{\sigma}_{\mu\nu} f_{0\nu e} + J_o f_{0\mu o}^+ \vec{\sigma}_{\mu\nu} f_{0\nu o}) + \\
 + \frac{1}{2}(\vec{S}_1 - \vec{S}_2) \cdot \sum_{\mu\nu} (J_{eo} f_{0\mu e}^+ \vec{\sigma}_{\mu\nu} f_{0\nu o} + h.c.) + \omega_p (f_{0p\mu}^+ + h.c.),
 \end{aligned}
 \tag{3.13}$$

e a partir dele prever o comportamento para a densidade espectral. Um tratamento de teoria de perturbação em segunda ordem fornece para a densidade espectral a seguinte expressão

$$\begin{aligned}
 \rho(\varepsilon) = \sum_f \left| \langle f | H_{eff} | \Omega \rangle \right|^2 \delta(\varepsilon - E_f - E_\Omega) = \\
 = \sum_f \left| \langle f | H_X | \Omega \rangle + \sum_m \frac{\langle f | H_J | m \rangle \langle m | H_X | \Omega \rangle}{E_f - E_m} \right|^2 \delta(\varepsilon - E_f - E_\Omega),
 \end{aligned}
 \tag{3.14}$$

com  $H_J$  e  $H_X$  representando o segundo e o terceiro termo da Eq. (3.13), respectivamente. O estado  $|m\rangle$  é um estado intermediário entre o inicial e o final. Os dois termos entre barras à direita na Eq. (3.14) descrevem duas contribuições para a densidade espectral na região  $\varepsilon < I$ . A primeira exige que o estado  $|f\rangle$  pertença à coluna da esquerda ( $\vec{S}_1 + \vec{S}_2 = 0$ ) na Fig.(3.4). Já a segunda descreve transições virtuais para estados intermediários  $|m\rangle$  na região de energias acima de  $I$  onde o termo  $J(\vec{S}_1 - \vec{S}_2)$  acopla as duas colunas. Substituindo  $E_f$  por  $\varepsilon$  e aproximando  $E_m$  por  $I$  na Eq. (3.14) escrevemos que, para  $\varepsilon < I$ , a densidade espectral tem a forma

$$\rho(\varepsilon) = \left( \rho_0 \pm \frac{\alpha}{I - \varepsilon} \right)^2 \quad (3.15)$$

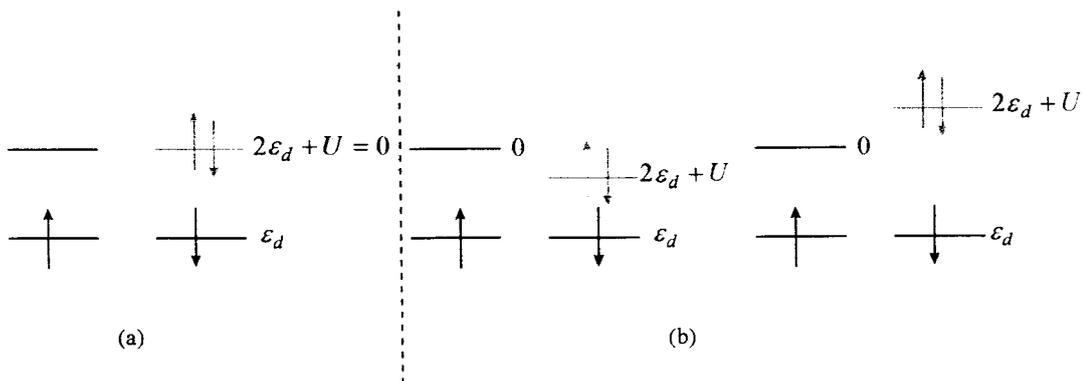
onde  $\rho_0$  é a raiz quadrada do valor da densidade espectral para  $\varepsilon \rightarrow 0$ ,  $\alpha$  é uma constante que deve ser próxima de  $J_{\text{eff}}$  e  $I$  o valor da interação RKKY. O sinal  $\pm$  aparece devido ao termo  $\langle f | H_J | \Omega \rangle$  que pode assumir valores positivos e negativos.

No nível de Fermi as densidades espectrais são diferentes de zero, e dadas pela equação de Langreth estendida para o modelo de duas impurezas — derivada na seção (3.3.1) — dada por

$$\rho_p(\varepsilon_F) = \frac{2}{\pi \Gamma_p} \text{sen}^2 \delta_p(\varepsilon_F). \quad (3.16)$$

Para  $k_F R = \pi$  temos que  $\Gamma_e = \Gamma_o$  e  $\delta_e = -\delta_o$ . Assim, para  $\varepsilon \rightarrow 0$   $\rho_e = \rho_o$  tanto para  $\varepsilon > 0$  quanto para  $\varepsilon < 0$ .

Devido a assimetria do problema as combinações par e ímpar das impurezas apresentam  $2\varepsilon_d + U \neq 0$ , isto é, as configurações  $d^0$  e  $d^2$  não são degeneradas. Na Fig.(3.5) mostramos (a) a configuração simétrica ( $2\varepsilon_d + U = 0$ ) e (b) as duas configurações assimétricas possíveis.



**Figura 3.5** - Representação esquemática das possíveis configurações do orbital localizado. Em (a) modelo simétrico,  $2\varepsilon_d + U = 0$ . Em (b) as duas configurações possíveis para o modelo assimétrico.

Comparando as excitações tipo partícula e buraco observam-se intensidades de transições diferentes. Por exemplo, se a Fig.(3.5.b) correspondesse a situação da combinação par entre as impurezas, encontraremos para  $\varepsilon > 0$  intensidade espectral maior que para  $\varepsilon < 0$ .

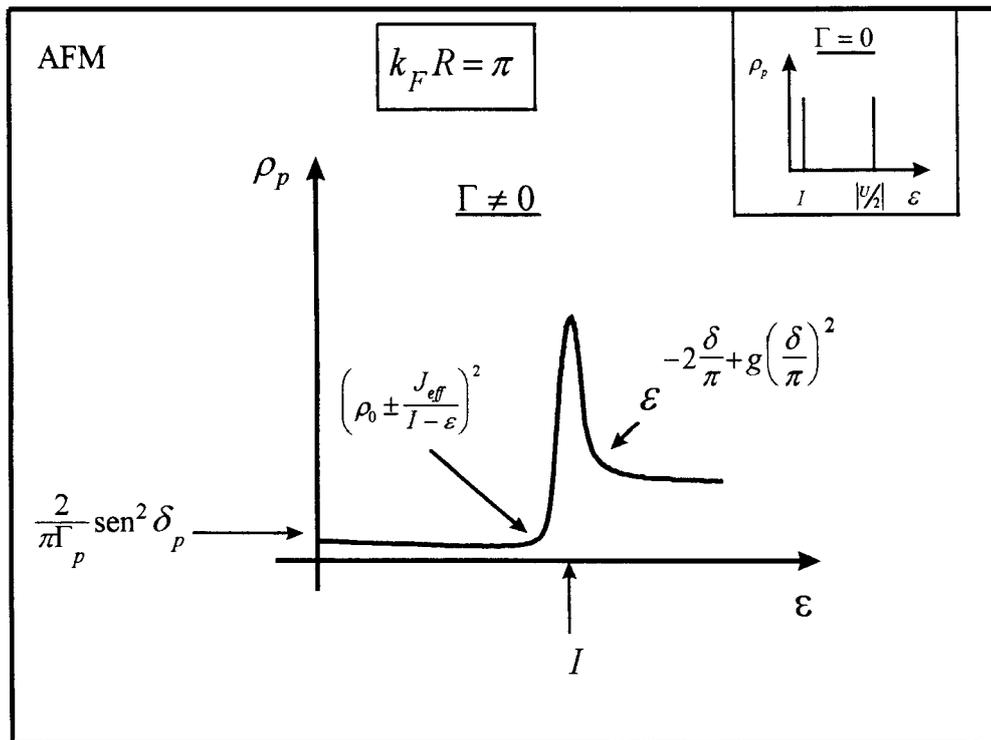
Outra característica que podemos observar é quanto a simetria das curvas de densidades espectrais sob transformações partícula-buraco. Para partícula o termo de acoplamento é

$$M_{\pm} = 1 \pm \frac{\text{sen}(k_F + \varepsilon)R}{(k_F + \varepsilon)R} = 1 \mp \frac{\text{sen } \varepsilon R}{\pi + \varepsilon R}, \quad (3.17)$$

quando  $k_F R = \pi$ , o sinal + refere-se a combinação par e o sinal - a combinação ímpar. Para buraco o mesmo termo é

$$M_{\pm} = 1 \pm \frac{\text{sen}(k_F - \varepsilon)R}{(k_F - \varepsilon)R} = 1 \pm \frac{\text{sen } \varepsilon R}{\pi - \varepsilon R}. \quad (3.18)$$

Comparando as duas equações observa-se que ocorre uma inversão aproximada  $M_+ \leftrightarrow M_-$  quando trocamos partícula por buraco (isto é  $\varepsilon \rightarrow -\varepsilon$ ). Ignorando a dependência energética dos denominadores  $(\pi + \varepsilon R)$  e  $(\pi - \varepsilon R)$ , que se tornam desprezíveis para  $\varepsilon \rightarrow 0$ , podemos esperar que a densidade espectral par para excitações tipo partícula seja igual a densidade espectral ímpar para excitações tipo buraco. Isso ressalta a importância de se manter a assimetria do modelo, sem a qual as densidades seriam forçosamente iguais. Essa simetria cruzada não aparece no caso ferromagnético, discutido na seção (3.2.3), pois lá  $k_F R = \pi/2$ .

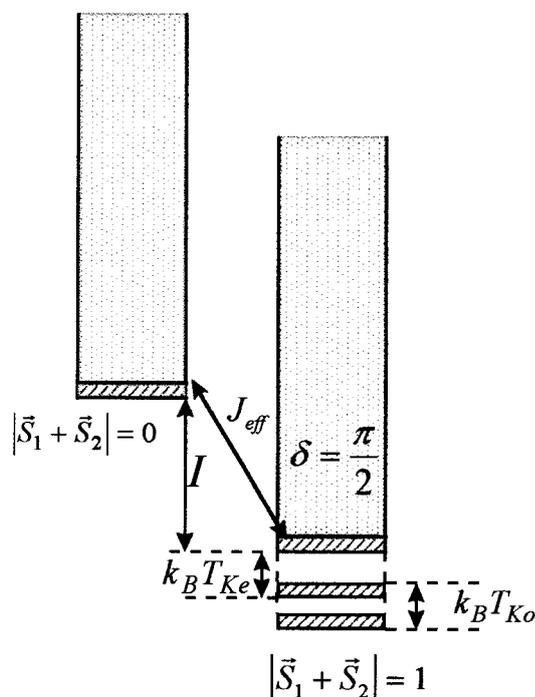


**Figura 3.6** - Esboço da densidade espectral para o modelo de Anderson de duas impurezas no regime antiferromagnético (AFM). Para  $\Gamma = 0$  (como indicado no detalhe) o espectro é composto por duas funções delta, uma da transição  $d^1 \rightarrow d^0$  (ou  $d^1 \rightarrow d^2$ ) em  $|U/2|$  e outra da transição entre os estados singleto  $\rightarrow$  tripleto em  $\varepsilon \sim I$ . Para  $\Gamma \neq 0$  as funções delta se alargam. Para  $\varepsilon \gg I$  a densidade espectral não pode diferir da encontrada no limite  $R \rightarrow \infty$ . Para energias  $\varepsilon > I$  as densidades espectrais obedecem a lei de potência de Nozières e De Dominicis, Eq.(3.8). Para  $\varepsilon < I$  transições virtuais são responsáveis por uma contribuição residual, Eq. (3.15), que se aproxima de uma constante para  $\varepsilon \rightarrow 0$ . No nível de Fermi o valor é dado pela equação de Langreth estendida para o modelo de duas impurezas, Eq.(3.16). Neste regime,  $k_F R = \pi$ , a assimetria partícula-buraco diferencia as densidades espectrais ressaltando a importância de se manter a assimetria natural do modelo.

### 3.2.3 - Regime Ferromagnético

Descrito pela desigualdade  $-I \gg k_B T_K$  o regime ferromagnético leva, a energias próximas de  $I$ , a formação de um estado tripleto entre as impurezas.

Para  $\varepsilon \gg I$ , assim como no caso Kondo e antiferromagnético, ocorre a transição  $d^1 \rightarrow d^0$ . Diminuindo  $\varepsilon$ , para  $\varepsilon \approx I$  ocorre o acoplamento ferromagnético formando um tripleto (estado fundamental) separado de um singleto pela energia  $I$ . Na Fig.(3.7) representamos qualitativamente o estado fundamental do regime ferromagnético.



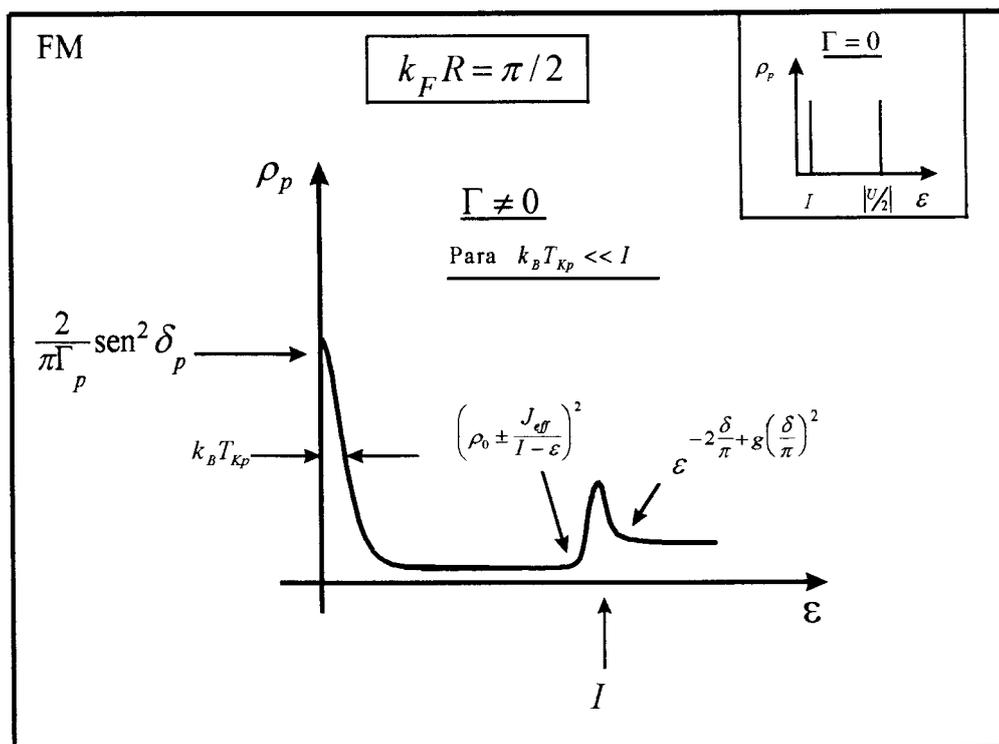
**Figura 3.7** - Representação esquemática do estado fundamental do regime ferromagnético. A diferença de energia entre o estado fundamental tripleto ( $\delta_r = \pi/2$ ) e o singleto é dada pela interação RKKY  $I$ . Para  $J \neq 0$  a energia no subespaço tripleto se reduz de  $k_B T_{Ke}$  na banda par e  $k_B T_{Ko}$  na banda ímpar. Os dois subespaços se misturam pelo acoplamento efetivo  $J_{eff}$ .

Transições a partir deste estado fundamental são semelhantes a do caso antiferromagnético. Quando  $J_{eff} = 0$  ocorre um pico na função delta para  $\varepsilon = I$ . Com  $J_{eff} \neq 0$  a função delta se alarga. Ocorrem diferenças nas alturas dos picos quando comparadas excitações tipo partícula e tipo buraco, mas neste caso **não** ocorre a inversão  $M_+ \leftrightarrow M_-$ .

Diminuindo  $\varepsilon$ , tal que  $\varepsilon \sim k_B T_{Ke} = \Gamma_{Ke}$  o canal par, mais fortemente acoplado as impurezas, reduz o momento magnético da impureza de  $S = 1$  para  $S = 1/2$ . Observa-se então na densidade par, para  $\varepsilon < \Gamma_{Ke}$ , uma ressonância semelhante a observada no regime Kondo.

Um segundo efeito Kondo ocorre para  $\varepsilon \sim k_B T_{Ko} = \Gamma_{Ko}$  quando a banda ímpar reduz o momento magnético da impureza com spin  $S = 1/2$  para  $S = 0$ . Com isso observa-se, na densidade ímpar outra ressonância, igual a do regime Kondo.

No nível de Fermi, o valor das densidades espectrais são dadas pela Eq.(3.16). Como  $\Gamma_e > \Gamma_o$  e  $\delta_e = -\delta_o \cong \pi/2$  o valor da densidade espectral ímpar para  $\varepsilon \rightarrow 0$  é maior que o da densidade par.



**Figura 3.8** - Esboço da densidade espectral para o modelo de Anderson de duas impurezas no regime ferromagnético (FM). Para  $\Gamma = 0$  (como indicado no detalhe) o comportamento é semelhante ao do caso antiferromagnético, lembrando que para  $\varepsilon \approx I$  ocorrem agora transições entre os estados tripleto (fundamental) e singleto. Quando  $\Gamma \neq 0$ , para  $\varepsilon > I$  segue a lei de potência de Nozières e De Dominicis e para  $\varepsilon < I$  a Eq.(3.15). Ao diminuir a energia, para  $\varepsilon \approx \Gamma_{\text{xe}}$ , a banda par reduz o spin da impureza de  $S = 1$  para  $S = 1/2$  e realça a densidade par. Para  $\varepsilon \approx \Gamma_{\text{xo}}$  a banda ímpar reduz o spin da impureza de  $S = 1/2$  para  $S = 0$  e realça a densidade ímpar. No nível de Fermi o valor é dado pela equação de Langreth estendida para o modelo de duas impurezas. A representação mostrada na figura é para uma dada paridade (par ou ímpar) que satisfaça a condição  $k_B T_{kp} \ll I$ .

### 3.3 - Densidade Espectral para $\varepsilon \rightarrow 0$

No apêndice II [Eq.(AII.3)] mostramos que a densidade espectral a ser calculada numericamente é dada, para ( $\varepsilon < 0$ ), pela expressão

$$\rho_{dp}(\varepsilon) = \sum_f \left. \frac{\left| \langle f | c_{dp} | \Omega \rangle \right|^2}{\left. \frac{d(E_f^z - E_\Omega^z)}{dz} \right|} \right|_{E_f^z - E_\Omega^z = \varepsilon} \quad (3.19)$$

Para  $\varepsilon > 0$  a expressão é semelhante.

A baixas energias,  $E_f^* \propto \Lambda^{-z} c(N, j, \delta)$ , onde  $c(N, j, \delta)$  é um valor independente de  $z$ , como vimos na seção (2.6). Assim, a derivada da Eq.(3.19) torna-se

$$\left| \frac{dE_f^*}{dz} \right| = E_f^* \ln \Lambda, \quad (3.20)$$

e podemos reescrever a Eq.(3.19) como

$$\rho_d(\varepsilon \rightarrow 0) = \begin{cases} \sum_f \frac{\left| \langle f | c_{dp} | \Omega \rangle \right|^2}{E_f^* \ln \Lambda} & (\varepsilon < 0) \\ \sum_f \frac{\left| \langle f | c_{dp}^+ | \Omega \rangle \right|^2}{E_f^* \ln \Lambda} & (\varepsilon > 0) \end{cases}, \quad (3.21)$$

onde  $E_f^* = \varepsilon_f \left( \frac{1 + \Lambda^{-1}}{2} \right) \Lambda^{-\frac{(N-1)}{2} + z_p - 1}$  e  $\varepsilon_f$  as energias numéricas.

Com a Eq.(3.21) calculamos as densidades numericamente. A literatura não traz resultados analíticos para a densidade espectral em função da energia. Assim,

para conferir a precisão de nossos resultados, desenvolvemos uma extensão para o modelo de duas impurezas do resultado encontrado por Langreth [14], para a densidade espectral no nível de Fermi do modelo de Anderson de uma impureza. A seguir, seção (3.3.1), apresentamos a derivação dessa extensão. Tal expressão permite calcular a densidade espectral no nível de Fermi que, comparada à calculada numericamente, permite avaliar a precisão de nossos resultados. De fato, como a sequência de energias  $\varepsilon$  do grupo de renormalização corre de  $\varepsilon = D$ , onde  $D$  é a largura da banda de condução, até  $\varepsilon \rightarrow 0$ , as energias baixas são as últimas a serem alcançadas e assim, os resultados a baixas energias configuram um teste exigente para o cálculo.

Outra maneira de se calcular a densidade espectral a baixas energias, por meio do Hamiltoniano efetivo do ponto fixo de baixas energias, aparece na seção (3.3.2). No ponto fixo de baixas energias um Hamiltoniano efetivo, equivalente ao Hamiltoniano original, permite a derivação de uma expressão para a densidade espectral. Em geral esta equação é mais precisa para o cálculo numérico da densidade espectral do que a Eq.(3.21).

### 3.3.1 - Cálculo analítico da densidade espectral no nível de Fermi

Dado o Hamiltoniano de Anderson de duas impurezas [Eq.(1.6)], explorando a simetria esférica de acoplamento entre banda de condução e impurezas e a simetria de inversão entre as impurezas, podemos reescrever o Hamiltoniano como

$$H = \sum_{p\sigma} \left\{ \int \varepsilon c_{\varepsilon p\sigma}^+ c_{\varepsilon p\sigma} d\varepsilon + \varepsilon_d c_{dp\sigma}^+ c_{dp\sigma} + \int d\varepsilon (c_{\varepsilon p\sigma}^+ c_{dp\sigma} V_p(\varepsilon) + h.c.) \right\} + H(U), \quad (3.22)$$

onde

$$\Rightarrow c_{\varepsilon p\sigma} = \frac{1}{2M_p} [c_{\varepsilon\sigma} \pm \bar{c}_{\varepsilon\sigma}] \quad \text{com,}$$

$$c_{\varepsilon\sigma} = \frac{1}{\sqrt{\rho(\varepsilon)}} \int e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}/2} \delta(\varepsilon - \varepsilon(\vec{k})) c_{\vec{k}\sigma} d^3\vec{k}.$$

$$\Rightarrow V_p(\varepsilon) = V_{sp} = VM_p(\varepsilon) \quad \text{e,} \quad M_p^2(\varepsilon) = \left[ 1 \pm \frac{\text{sen } k(\varepsilon)R}{k(\varepsilon)R} \right]. \quad (3.23)$$

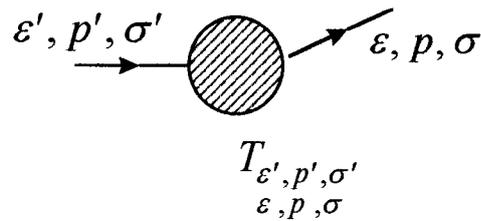
$$\Rightarrow c_{dp\sigma} = \frac{c_{d1\sigma} \pm c_{d2\sigma}}{\sqrt{2}}.$$

$$\Rightarrow H(U) = \frac{U}{2} \left[ c_{de\uparrow}^+ c_{de\downarrow}^+ c_{de\downarrow} c_{de\uparrow} + c_{do\uparrow}^+ c_{do\downarrow}^+ c_{do\downarrow} c_{do\uparrow} + c_{de\uparrow}^+ c_{do\downarrow}^+ c_{do\downarrow} c_{de\uparrow} + c_{do\uparrow}^+ c_{de\downarrow}^+ c_{de\downarrow} c_{do\uparrow} + \right. \\ \left. + c_{de\uparrow}^+ c_{de\downarrow}^+ c_{do\downarrow} c_{do\uparrow} + c_{do\uparrow}^+ c_{do\downarrow}^+ c_{de\downarrow} c_{de\uparrow} + c_{de\uparrow}^+ c_{do\downarrow}^+ c_{de\downarrow} c_{do\uparrow} + c_{do\uparrow}^+ c_{de\downarrow}^+ c_{do\downarrow} c_{de\uparrow} \right].$$

A matriz  $T$  [42], definida a partir da matriz  $S$ , é

$$S_{\varepsilon'p'\sigma',\varepsilon p\sigma} = \delta_{\varepsilon'p'\sigma',\varepsilon p\sigma} - 2i\pi\delta(\varepsilon - \varepsilon') T_{\varepsilon'p'\sigma',\varepsilon p\sigma}. \quad (3.24)$$

Dado que os elétrons de condução se acoplam somente com as impurezas (eles não interagem), na Fig.(3.9) representamos diagramaticamente a matriz  $T$  do processo de espalhamento considerado.

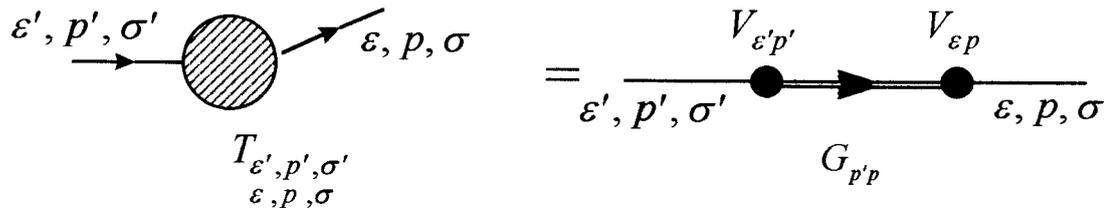


**Figura 3.9** - Representação esquemática de um processo de espalhamento que define a matriz  $T$ . Os elétrons de condução com energia  $\varepsilon'$ , paridade  $p'$  e spin  $\sigma'$  são espalhados pela impureza saindo com energia  $\varepsilon$ , paridade  $p$  e spin  $\sigma$ .

Expandindo  $T$  em função do acoplamento  $V$  temos então que

$$T_{\varepsilon'p'\sigma',\varepsilon p\sigma} = V_{\varepsilon'p'} G_{\sigma'p'\sigma p}(\varepsilon + i\eta) V_{\varepsilon p}. \quad (3.25)$$

Na Fig.(3.10) representamos diagramaticamente a matriz  $T$  expandida em  $V$ .



**Figura 3.10** - Representação diagramática do processo de espalhamento. O lado esquerdo é a Fig.(3.9). O lado direito representa a matriz  $T$  em termos da função de Green das impurezas  $G_{p'p}$  e do acoplamento  $V$ .

Observe que o termo Coulombiano  $U$  está escondido na função de Green da impureza. O resultado que iremos derivar é independente de  $U$ .

A baixas energias, região de nosso interesse, não ocorre troca de spin e nem mudança no canal de condução. Na seção (3.3.2.b), utilizando o formalismo do grupo de renormalização, encontramos o Hamiltoniano efetivo perto do ponto fixo de baixas energias e mostramos que os operadores deste Hamiltoniano, que permitem troca de spin e de canal de condução, são todos irrelevantes, não contribuindo para as

propriedades calculadas a baixas energias. Assim, a partir daqui, desprezamos o índice de spin. É conveniente, no entanto, manter o índice de paridade uma vez que  $V_{sp}$  depende de  $p$ . Nesse limite a matriz  $T$  na Eq.(3.25) passa a ser diagonal nos índices  $p$  e  $\sigma$ .

Para as análises subsequentes, define-se a auto-energia  $\Sigma_p(z)$  [42] da maneira usual

$$G_p^{-1}(z) = z - \varepsilon_d - \Sigma_p(z), \quad (3.26)$$

onde  $\Sigma_p(z) = \text{Re} \Sigma_p(z) + i \text{Im} \Sigma_p(z)$ .

As partes imaginárias, importantes em nossa análise, são definidas acima e abaixo do nível de Fermi por

$$\Gamma_p(\omega) = -\text{Im} \Sigma_p(\omega + i\eta) = \text{Im} \Sigma_p(\omega - i\eta). \quad (3.27)$$

De acordo com o teorema óptico [42], a taxa de transição total de um elétron de momentum  $k$  acima da superfície de Fermi para todos os estados finais conservando energia é

$$\tau^{-1}(\varepsilon) = -2\text{Im}T_{\varepsilon\varepsilon}. \quad (3.28)$$

Substituindo a Eq.(3.25)

$$\tau^{-1}(\varepsilon) = -2\text{Im} [V_{sp}G_p(\varepsilon + i\eta)V_{sp}], \quad (3.29)$$

e, lembrando que a função espectral  $\rho_p(\varepsilon)$  é definida como  $\rho_p(\varepsilon) = -\text{Im}G_p(\varepsilon + i\eta)$

[42] temos

$$\tau^{-1}(\varepsilon) = 2|V_{ep}|^2 \rho_p(\varepsilon). \quad (3.30)$$

Por outro lado, a razão de transição devido ao espalhamento elástico é

$$\tau_e^{-1}(\varepsilon) = 2\pi \sum_{\varepsilon'} |T_{\varepsilon'\varepsilon}|^2 \delta(\varepsilon - \varepsilon'). \quad (3.31)$$

Substituindo a Eq.(3.25)

$$\tau_e^{-1}(\varepsilon) = 2\pi |V_{ep}|^2 \sum_{\varepsilon'} |V_{\varepsilon p}|^2 |G_p(\varepsilon + i\eta)|^2 \delta(\varepsilon - \varepsilon'). \quad (3.32)$$

Mas  $|G_p(\varepsilon + i\eta)|^2 = \frac{\rho_p(\varepsilon)}{\Gamma_p(\varepsilon)}$ . Assim

$$\tau_e^{-1}(\varepsilon) = 2|V_{ep}|^2 \rho_p(\varepsilon) \left[ \pi \sum_{\varepsilon'} \frac{|V_{\varepsilon p}|^2 \delta(\varepsilon - \varepsilon')}{\Gamma_p(\varepsilon)} \right]. \quad (3.33)$$

Como  $\tau^{-1} \geq \tau_e^{-1}$  comparando as Eqs.(3.30) e (3.33) temos

$$\Gamma_p(\varepsilon) \geq \pi \sum_{\varepsilon'} |V_{\varepsilon p}|^2 \delta(\varepsilon - \varepsilon'). \quad (3.34)$$

Em geral, o estado final pode consistir de um elétron mais algum número de pares elétron-buraco, de forma que a Eq.(3.34) não ajuda muito. Entretanto, quando  $\varepsilon$  se aproxima do nível de Fermi ( $\varepsilon = \varepsilon_F$ ), todos os espalhamentos inelásticos vão a zero e  $\tau^{-1} = \tau_e^{-1}$ . Assim

$$\Gamma_p(\varepsilon_F) = \pi \sum_{\varepsilon'} |V_{\varepsilon p}|^2 \delta(\varepsilon_F - \varepsilon'). \quad (3.35)$$

Substituindo a soma por integral, isto é, fazendo  $\sum_{\varepsilon'} \rightarrow \int \rho(\varepsilon') d\varepsilon'$  com

$\rho(\varepsilon') = \text{constante}$ , encontramos que

$$\Gamma_p(\varepsilon_F) = \pi \int |V_{\varepsilon'p}|^2 \delta(\varepsilon_F - \varepsilon') d\varepsilon', \quad (3.36)$$

e,

$$\Gamma_p(\varepsilon_F) = \pi |V_{\varepsilon_F p}|^2 \quad (3.37)$$

onde  $V_{\varepsilon_F p} = VM_p(\varepsilon_F)$ .

Com isso podemos calcular a densidade espectral no nível de Fermi, definida por

$$\rho_p(\varepsilon_F) = -\sum_{\sigma} \frac{1}{\pi} \text{Im} G_p(\varepsilon_F). \quad (3.38)$$

Usando a Eq.(3.26) encontramos

$$\rho_p(\varepsilon_F) = -\frac{2}{\pi} \frac{\text{Im} \Sigma_p(\varepsilon_F)}{[\varepsilon_F - \varepsilon_d - \text{Re} \Sigma_p(\varepsilon_F)]^2 + [\text{Im} \Sigma_p(\varepsilon_F)]^2}, \quad (3.39)$$

e a Eq.(3.27)

$$\rho_p(\varepsilon_F) = \frac{2}{\pi} \frac{\Gamma_p}{[\varepsilon_F - \varepsilon_d - \text{Re} \Sigma_p(\varepsilon_F)]^2 + [\Gamma_p]^2}. \quad (3.40)$$

O deslocamento de fase [42] é definido, considerando que  $G = |G|e^{i\delta}$ , por

$$\tan[\delta_p(\varepsilon)] = \frac{\text{Im} \Sigma_p(\varepsilon)}{[\varepsilon - \varepsilon_d - \text{Re} \Sigma_p(\varepsilon)]}. \quad (3.41)$$

Substituindo a Eq.(3.27), temos para  $\varepsilon = \varepsilon_F$

$$\frac{\text{sen} \delta_p(\varepsilon_F)}{\text{cos} \delta_p(\varepsilon_F)} = \frac{\Gamma_p}{\left[ \varepsilon_F - \varepsilon_d - \text{Re} \Sigma_p(\varepsilon_F) \right]}. \quad (3.42)$$

Após algumas manipulações trigonométricas encontramos que

$$\text{sen}^2 \delta_p(\varepsilon_F) = \frac{\Gamma_p^2}{\left[ \varepsilon_F - \varepsilon_d - \text{Re} \Sigma_p(\varepsilon_F) \right]^2 + \Gamma_p^2}. \quad (3.43)$$

Comparando as Eqs.(3.40) e (3.43), temos que

$$\boxed{\rho_p(\varepsilon_F) = \frac{2}{\pi \Gamma_p} \text{sen}^2 \delta_p(\varepsilon_F)} \quad (3.44)$$

Assim, estendemos a expressão de Langreth [14] para a densidade espectral do modelo de uma impureza com correlação eletrônica para o modelo de duas impurezas. A expressão relaciona a densidade espectral com a defasagem da banda de condução no nível de Fermi  $\delta_p$  e com a largura de hibridização  $\Gamma_p$ . A diferença entre as expressões para uma e duas impurezas fica por conta da dependência da paridade no segundo caso. Convém ressaltar que a Eq.(3.44), independente do termo Coulombiano  $U$ , é exata para qualquer  $U$ .

Na Eq.(3.44)  $\Gamma_p$  é dado pela Eq.(3.37). O cálculo das defasagens das bandas de condução par e ímpar no nível de Fermi, apresentado na seção (2.6.2.b) segue a prescrição recentemente desenvolvida por Silva e colaboradores [13,27].

### 3.3.2 - Densidade espectral no ponto fixo de baixas energias

Nessa seção vamos mostrar como a densidade espectral para  $\varepsilon \rightarrow 0$  pode ser calculada a partir do espectro de energia, obtido da diagonalização iterativa no limite de  $N$  grande, ou seja, a partir do ponto fixo de baixas energias. Esse procedimento, na prática, introduz uma forma alternativa em geral mais precisa para o cálculo numérico da densidade espectral do que a Eq.(3.21).

Mostramos no Cap. II que, após um número grande de iterações, o Hamiltoniano de Anderson de duas impurezas se aproxima do ponto fixo de acoplamento forte dado pelo Hamiltoniano da Eq.(2.78), com  $\tilde{G}$  dependendo dos parâmetros do modelo. Em particular se  $R \rightarrow \infty$ ,  $\tilde{G} = 0$ . Vamos denotar por  $H^*$  o Hamiltoniano desse ponto fixo. Assim, no limite  $N \rightarrow \infty$ ,  $\lim_{N \rightarrow \infty} H_N^* = H^*$ .

Em geral, o modelo é bem descrito, para  $N$  grande, por um Hamiltoniano efetivo  $H_N^{eff}$  que é a soma do Hamiltoniano do ponto fixo  $H_N^*$ , cujo comportamento já discutimos, com pequenos desvios  $\Delta H_N$ . Em geral escrevemos,

$$H_N^{eff} = H_N^* + \Delta H_N \quad (3.45)$$

Descrevemos na próxima seção (3.3.2.a) as propriedades gerais do GRN que  $H_N^{eff}$  obedece. Em seguida, seção (3.3.2.b), determinamos  $H_N^{eff}$  para o nosso caso. Finalmente, na seção (3.3.2.c) calculamos a densidade espectral utilizando  $H_N^{eff}$ .

### 3.3.2.a - Hamiltoniano Efetivo - Propriedades Gerais

Para  $N$  grande, o Hamiltoniano efetivo,  $H_N^{eff}$ , é escrito como

$$H_N^{eff} = H_N^* + \Delta H_N \quad (3.46)$$

onde  $H_N^*$  é o Hamiltoniano de ponto fixo e  $\Delta H_N$  é uma pequena correção que diminui a medida que  $N$  aumenta.

A transformação do GRN definida na Eq.(2.54) multiplica o Hamiltoniano por  $\Lambda^{(N-1)2}$ . É conveniente extrair esse fator de  $\Delta H_N$ . Escrevemos então

$$H_N^{eff} = H_N^* + \sum_i \Lambda^{\frac{N-1}{2}} \omega_i \delta H_i, \quad (3.47)$$

onde os  $\delta H_i$  são operadores com a simetria do Hamiltoniano de Anderson que dependem dos graus de liberdade  $f_1, f_2, \dots$  que definem o ponto fixo  $H_N^*$ . Os  $\omega_i$  são os coeficientes desses operadores que dependem dos valores iniciais das constantes de acoplamento.

Um conceito muito importante da teoria do grupo de renormalização é o de estabilidade de um ponto fixo [19]. Sabemos, do Cap. II, que  $H_{N+2}^{eff} \equiv \tau^2[H_N^{eff}]$ ; como  $\Delta H_N$  é pequeno comparado a  $H_N^*$  podemos expandi-lo em torno de  $H_N^*$  e manter somente o termo linear resultando em

$$H_N^{eff} = H_{N+2}^* + \mathcal{L}(H_N^*) \Delta H_N + \dots \quad (3.48)$$

onde,  $\mathcal{L}(H_N^*)$  é uma transformação linear dependente do ponto fixo, que para  $N$  grande se aproxima de  $\mathcal{L}^*$ .

Como  $H_{N+2}^{eff} - H_{N+2}^* = \Delta H_{N+2}$  obtemos

$$\Delta H_{N+2} = \mathcal{L}^* \Delta H_N^*. \quad (3.49)$$

Para a transformação linear  $\mathcal{L}^*$  existem alguns operadores  $\mathcal{O}_i^*$  que diagonalizam  $\mathcal{L}^*$  com autovalores  $\lambda_i^*$ , isto é

$$\mathcal{L}^* \mathcal{O}_i^* = \lambda_i^* \mathcal{O}_i^*. \quad (3.50)$$

Podemos portanto expandir o operador  $\Delta H_N$  em combinações lineares de  $\mathcal{O}_i^*$  e  $\lambda_i^*$  do operador  $\mathcal{L}^*$  resultando em

$$\Delta H_N = \sum_l c_l \lambda_l^{*N/2} \mathcal{O}_l^*, \quad (3.51)$$

que satisfaz a Eq.(3.48) para constantes  $c_l$  arbitrárias.

A partir dos valores de  $\{\lambda_i^*\}$  encontramos a relevância dos operadores  $\{\mathcal{O}_i^*\}$ , e assim a estabilidade do ponto fixo. Se  $\lambda_i^* > 1$  implica que  $\mathcal{O}_i^*$  é um operador relevante, se  $\lambda_i^* = 1$  ele é marginal e se  $\lambda_i^* < 1$  é irrelevante. Se todos os operadores  $\mathcal{O}_i^*$  são irrelevantes, o ponto fixo é estável (o ponto fixo a baixas energias é um exemplo). A presença de um operador relevante, ou de um marginal, torna o ponto fixo instável.

### 3.3.2.b- Hamiltoniano efetivo perto do ponto fixo de baixas energias

A discussão acima é comum para todos os Hamiltonianos efetivos. Mostramos nesta seção como obter os coeficientes  $\{\omega_i\}$  e os operadores  $\{\delta H_i\}$  que determinam o Hamiltoniano efetivo para baixas energias.

Para encontrar o conjunto  $\{\delta H_i\}$  precisamos encontrar, para ordens menores que  $\Lambda^{-1}$ , todos os operadores que conservam a simetria do Hamiltoniano original, isto é, conservam carga, spin e paridade, e também são consistentes com os graus de liberdade do Hamiltoniano de ponto fixo. Esses graus de liberdade são definidos pelos operadores fermiônicos

$$f_{1e\mu}, f_{1o\mu}, f_{2e\mu}, f_{2o\mu}, \dots \quad (3.52)$$

Como pode ser observado, por exemplo, na Tab.(2.5), o operador  $f_{1p\mu}$  ( que tem o papel de  $f_{0p\mu}$ ) em  $\delta H_i$  gera um fator  $\Lambda^{-(N-1)/4}$ , enquanto que  $f_{2p\mu}$  ( que substitui  $f_{1p\mu}$ ) gera um fator  $\Lambda^{-3(N-1)/4}$ . Para encontrar os operadores mais relevantes, isto é, aqueles cujos autovalores são potências mais positivas de  $\Lambda$ , devemos tentar construí-los primeiro a partir dos  $f_{1p\mu}$ , em seguida só de combinações de  $f_{1p\mu}$  e  $f_{2p\mu}$  e assim por diante. Em cada caso, devemos garantir que a combinação conserve carga, spin e paridade.

Existem seis operadores preservando as simetrias com autovalor  $\lambda^* = \Lambda^{-1}$ .

São eles [6,7]

$$\delta H_1 \equiv \Lambda^{-(N-1)} \mathcal{O}_{U_e} = (n_e - 1)^2,$$

$$\delta H_2 \equiv \Lambda^{-(N-1)} \mathcal{O}_{U_o} = (n_o - 1)^2,$$

$$\delta H_3 \equiv \Lambda^{-(N-1)} \mathcal{O}_{U_{eo}} = (n_e - 1)(n_o - 1) + 2(f_{1e\uparrow}^+ f_{1e\downarrow}^+ f_{1o\downarrow} f_{1o\uparrow} + f_{1o\uparrow}^+ f_{1o\downarrow}^+ f_{1e\downarrow} f_{1e\uparrow}),$$

$$\delta H_4 \equiv \Lambda^{-(N-1)} \mathcal{O}_{J_{eo}} = f_{1e\mu}^+ \bar{\sigma}_{\mu\mu'} f_{1e\mu'} \cdot f_{1o\mu}^+ \bar{\sigma}_{\mu\mu'} f_{1o\mu'}, \quad (3.53)$$

$$\delta H_5 \equiv \Lambda^{-(N-1)} \mathcal{O}_{t_e} = f_{2e\mu}^+ f_{1e\mu} + f_{1e\mu}^+ f_{2e\mu} \mathbf{e},$$

$$\delta H_6 \equiv \Lambda^{-(N-1)} \mathcal{O}_{t_o} = f_{2o\mu}^+ f_{1o\mu} + f_{1o\mu}^+ f_{2o\mu}.$$

Aqui  $n_p \equiv f_{1p\uparrow}^+ f_{1p\uparrow} + f_{1p\downarrow}^+ f_{1p\downarrow}$ , para  $p = e, o$ . Os operadores  $\mathcal{O}_{U_e}, \mathcal{O}_{U_o}, \dots$  são definidos com a dependência em  $N$  fatorada. Os coeficientes  $\{\omega_i\}$  são, para esses operadores, renomeados,  $U_e, U_o, \dots$ , para refletir as propriedades físicas dos vários operadores e dependem dos parâmetros iniciais. Os operadores  $\mathcal{O}_{U_e}, \mathcal{O}_{U_o}$ , da mesma maneira que a repulsão Coulombiana, favorecem a ocupação de  $f_1$  com um elétron par ou ímpar, respectivamente; os  $\mathcal{O}_{U_{eo}}, \mathcal{O}_{J_{eo}}$  refletem as correlações entre os canais par e ímpar; os  $\mathcal{O}_{t_e}, \mathcal{O}_{t_o}$  são termos de *hopping* similares aos termos de energia cinética de um modelo *tight-binding*.

Para calcular as densidades espectrais incorporamos ao Hamiltoniano original o termo  $c_{d\mu}^+$  e  $c_{d\mu}$  — para espectros medidos em experiências BIS e XPS, respectivamente. Esses termos não conservam carga, nem spin, nem paridade. Aqui, definimos dois operadores que têm o mesmo papel; são eles

$$\delta H_7 = \omega_e (f_{1e\mu}^+ + f_{1e\mu}) \mathbf{e},$$

$$\delta H_8 = \omega_o (f_{1o\mu}^+ + f_{1o\mu}), \quad (3.54)$$

que possuem as mesmas características: não conservam carga, spin ou paridade.

Embora esses operadores possuam autovalor  $\Lambda^{1/2}$  sendo portanto operadores relevantes, os coeficientes  $\omega_p$  são infinitesimais e podem ser tratados perturbativamente.

Podemos, assim, escrever o Hamiltoniano efetivo como

$$H_N^{eff} = H_{N,SC} + \Lambda^{-(N-1)/2} \left\{ U_e \mathcal{O}_{U_e} + U_o \mathcal{O}_{U_o} + U_{eo} \mathcal{O}_{U_{eo}} + J_{eo} \mathcal{O}_{J_{eo}} + t_e \mathcal{O}_{t_e} + t_o \mathcal{O}_{t_o} \right\} + \Lambda^{(N-1)/2} \sum_{p\mu} \omega_p (f_{1p\mu}^+ + h.c.), \quad (3.55)$$

com  $H_{N,SC}$  dado na Eq.(2.78). Por mais que o último termo aumente com  $N$ , para os

valores que trabalhamos  $\Lambda^{(N-1)/2} \omega_p \ll 1$ .

Embora alguns operadores descritos acima permitam *spin-flip* ( $\delta H_4$ ) e troca do canal de condução ( $\delta H_5$ ) todos são irrelevantes configurando um ponto fixo estável, e podemos afirmar que **a baixas energias não ocorre troca de spin e nem troca do canal de condução**. Essas informações são importantes, como vimos na seção (3.3.1), para derivar a extensão da fórmula de Langreth.

### 3.3.2.c- Cálculo da densidade espectral usando $H_{eff}$

Para calcular a densidade espectral a baixas energias, isto é, no ponto fixo estável, usamos o Hamiltoniano dado na Eq.(3.55). O cálculo da densidade espectral, usando o Hamiltoniano efetivo e o Hamiltoniano original, deve obedecer a igualdade

$$\frac{1}{g_{\Omega}} \sum_{\mu} \sum_{j=1}^g \left| \langle \varepsilon_r, j | H_{eff} | \Omega \rangle \right|^2 = \frac{1}{g_{\Omega}} \sum_{\mu} \sum_{j=1}^g \left| \langle \varepsilon_r, j | H | \Omega \rangle \right|^2 \quad (3.56)$$

onde  $|\Omega\rangle$  representa o estado fundamental  $(Q, ds, p, r)$ , e  $|\varepsilon_r, j\rangle$  é o  $r$ -ésimo estado final  $(Q\pm 1, ds\pm 1, p', r'_j)$ , onde  $j$  representa a degenerescência ( $j = 1, \dots, g$ ), com energia  $\varepsilon_r$ .  $g_{\Omega}$  é a degenerescência do estado fundamental,  $ds = 2S$ .

O lado direito da Eq.(3.56) fornece justamente os elementos de matriz,

$$\frac{1}{g_{\Omega}} \sum_{\mu} \left| \langle \varepsilon_r | c_{dp} | \Omega \rangle \right|^2 \text{ e } \frac{1}{g_{\Omega}} \sum_{\mu} \left| \langle \varepsilon_r | c_{dp}^+ | \Omega \rangle \right|^2, \text{ que calculamos usando o Hamiltoniano de}$$

Anderson de duas impurezas original no processo iterativo do GRN. Vamos calcular, então o lado esquerdo da Eq.(3.56). Para simplificar, vamos calcular apenas os

elementos  $\frac{1}{g_{\Omega}} \sum_{\mu} \left| \langle \varepsilon_r | c_{dp}^+ | \Omega \rangle \right|^2$ , onde  $|\varepsilon_r, j\rangle$  é representado pelo setor  $(Q+1, ds\pm 1,$

$p', r'_j)$  (o mesmo raciocínio é válido para o outro elemento). Com isso, se

substituímos a Eq.(3.55) na Eq.(3.56) é fácil verificar que apenas o último termo terá contribuição diferente de zero, isto é,

$$\frac{1}{g_{\Omega}} \sum_{\mu} \sum_{j=1}^g \left| \langle \varepsilon_r, j | H_{eff} | \Omega \rangle \right|^2 = \frac{1}{g_{\Omega}} \sum_{\mu p} \sum_{j=1}^g \omega_p^2 \left| \langle \varepsilon_r, j | f_{1p\mu}^+ | \Omega \rangle \right|^2. \quad (3.57)$$

Usando o teorema de Wigner-Eckart [36],

$$\sum_{\mu p} \sum_{j=1}^g \langle Q', S', S'_z, p', r' | f_{1p\mu}^+ | Q, S, S_z, p, r \rangle = \langle S, S_z, \frac{1}{2} \mu | S', S'_z \rangle \langle Q', S', p', r' | f_{1p}^+ | Q, S, p, r \rangle, \quad (3.58)$$

para descartar a dependência em  $S_z$  no lado direito da Eq.(3.57) e, desenvolvendo os dois lados da Eq.(3.58) encontramos

$$\langle q+1, S+\frac{1}{2}, p', r' | f_{1p}^+ | q, S, p, r \rangle = \Lambda^{\frac{(N-1)}{4}} \alpha_{1p} \quad (NE) \quad (3.59)$$

$$\langle q+1, S-\frac{1}{2}, p', r' | f_{1p}^+ | q, S, p, r \rangle = \sqrt{\frac{2S+2}{2S}} \Lambda^{\frac{(N-1)}{4}} \alpha_{1p} \quad (NW), \quad (3.60)$$

onde os coeficientes  $\alpha_{1p}$  são, para  $R \rightarrow \infty$  ( $\tilde{G} = 0$ ), os da Tab.(2.5) e Tab.(2.6),  $N$  par e ímpar, respectivamente. Para  $R = \pi$  ou  $\pi/2$  ( $\tilde{G} \neq 0$ ), estão listados nas Tabelas (2.7) e (2.8),  $N$  ímpar e par, respectivamente. Os símbolos  $NE$  e  $NW$  são os mesmos que usamos no Ap.(II) —  $NE$  é a direção Nordeste em que o estado  $(Q+1, ds+1, p')$  se encontra em relação a  $(Q, ds, p)$  e,  $NW$  a direção Noroeste em que o estado  $(Q+1, ds-1, p')$  se encontra em relação a  $(Q, ds, p)$  em diagramas como os da Fig.(AII.1). Usando as Eqs.(3.56), (3.57), (3.58), (3.59) e (3.60) obtemos

$$\frac{1}{g_{\Omega}} \sum_{\mu} \left| \langle \varepsilon_r | c_{dp}^+ | \Omega \rangle \right|^2 = \omega_p^2 (\tilde{\alpha}_{1p})^2 \begin{cases} \frac{2(S+1)}{2S+1} & (NE) \\ \frac{2S}{2S+1} & (NW) \end{cases}. \quad (3.61)$$

A Eq.(3.61) relaciona as intensidades espectrais, par e ímpar, encontradas numericamente, com os parâmetros  $\omega_p$  e  $\tilde{\alpha}_{1lp}$  ( $\tilde{\alpha}_{1lp} = \Lambda^{(N-1)/4} \alpha_{1lp}$ ) relacionados ao Hamiltoniano efetivo do ponto fixo a baixas energias. Por meio da Eq.(3.61) encontramos os valores para  $\omega_p^2$  que são usados no cálculo das densidades espectrais para  $\varepsilon \rightarrow 0$ .

Como descrito no início da seção (3.3), Eq.(3.21), calculamos as densidades espectrais para  $\varepsilon \rightarrow 0$  por meio da equação

$$\rho_p(\varepsilon \rightarrow 0) = \frac{1}{g_\Omega} \sum_\mu \frac{|\langle \varepsilon_r | c_{dp}^\dagger | \Omega \rangle|^2}{E_r \ln \Lambda}, \quad (3.62)$$

com  $E_r = \varepsilon_r \left( \frac{1 + \Lambda^{-1}}{2} \right) \Lambda^{-\frac{(N-1)}{2} + z_p - 1}$  e  $\varepsilon_r$  as energias numéricas. Substituindo na Eq.(3.62) o resultado encontrado com o Hamiltoniano efetivo, Eq.(3.61), e o valor de  $\varepsilon_r = \eta_{lp}^*$ , dado na Tab.(2.5) ou na Tab.(2.6), dependendo se  $N$  par ou ímpar, obtemos, quando  $\tilde{G} = 0$

$$\rho_p(\varepsilon \rightarrow 0) = \frac{\omega_p^2}{A_\Lambda} \quad (R \rightarrow \infty), \quad (3.63)$$

onde  $A_\Lambda = \left( \frac{1 + \Lambda^{-1}}{1 - \Lambda^{-1}} \right) \frac{\ln \Lambda}{2}$ .

No caso  $\tilde{G} \neq 0$ , as bandas de condução adquirem defasagens  $\delta_{e,o}$  nos canais par e ímpar, respectivamente. Substituindo na Eq.(3.62)  $\varepsilon_r$  e  $\alpha_{1lp}$  dados na Tab.(2.7) ou na Tab.(2.8) para  $N$  ímpar ou par, obtemos

$$\rho_p(\varepsilon \rightarrow 0) = \frac{\omega_p^2}{A_\Lambda} \cos^2 \delta_p. \quad (3.64)$$

Resumindo, na prática, usando a Eq.(3.21) calculamos as densidades espectrais que denominamos densidades numéricas. Usando a Eq.(3.61) calculamos  $\omega_p^2$ , que dependendo dos parâmetros do modelo é substituída na Eq.(3.63) ou na Eq.(3.64) para calcular as denominadas densidades  $\omega_p$ . Em geral, devido ao truncamento numérico que precisamos efetuar, as Eqs.(3.63) e (3.64) são mais precisas do que a Eq.(3.21). Uma vez calculado  $\omega_p$ , que depende apenas dos parâmetros iniciais do modelo, as densidades  $\omega_p$  podem ser calculadas independente do parâmetro de discretização  $z$ . O mesmo não ocorre com as densidades calculadas pela Eq.(3.21), as energias variam com  $z$  e conseqüentemente o corte afeta os resultados.

Com a Eq.(3.44), derivada na seção anterior, calculamos a densidade espectral. No Cap. IV apresentamos os resultados obtidos.

## CAPÍTULO IV

# RESULTADOS NUMÉRICOS PARA A DENSIDADE ESPECTRAL

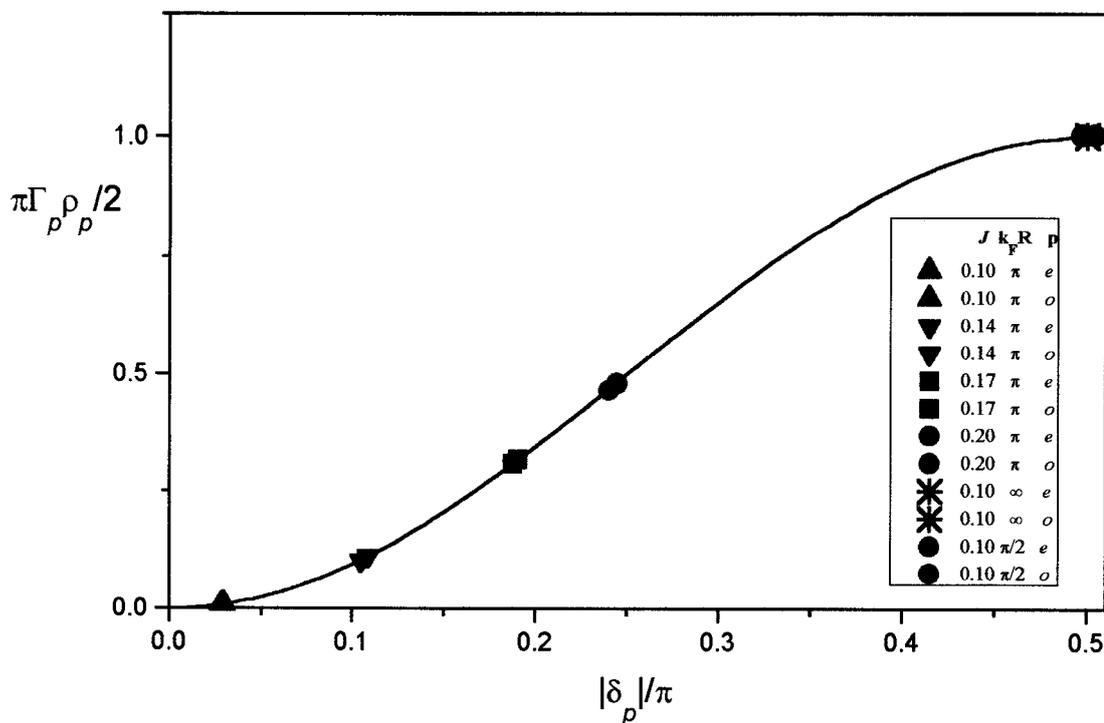
### 4.1 – Nível de Fermi ( $\varepsilon \rightarrow 0$ )

No Cap.III derivamos a extensão da equação de Langreth para o modelo de duas impurezas que serve para conferir os resultados quando  $\varepsilon \rightarrow 0$ .

Na Fig.(4.1) comparamos nossos resultados numéricos [Eqs.(3.63) e (3.64)] com a equação analítica [Eq.(3.44)]. A distância entre as impurezas é tomada para os três regimes assintóticos; o regime Kondo  $k_F R \rightarrow \infty$ , o regime antiferromagnético  $k_F R = \pi$  e o regime ferromagnético  $k_F R = \pi/2$ .

Nos regimes Kondo e ferromagnético a defasagem no nível de Fermi é  $\pi/2$ , como esperado. No regime antiferromagnético varia-se o valor do acoplamento  $J$  com a banda de condução. Para  $J = 0.1$  o acoplamento antiferromagnético é forte e a defasagem dos níveis de condução está próxima de zero. Aumentando o valor de  $J$  a defasagem aumenta. Em qualquer um, a excelente concordância entre os pontos e a

curva contínua (verde) indica que a diagonalização do Hamiltoniano determina a densidade espectral no limite  $\varepsilon \rightarrow 0$  com precisão muito satisfatória.



**Figura 4.1** – Densidades espectrais par (*e*) e ímpar (*o*) no nível de Fermi. Os símbolos (▲,+,■,●,\*,◆) são nossos resultados numéricos e a linha sólida nosso resultado analítico, Eq.(3.42). Para  $k_p R \rightarrow \infty$  as impurezas estão isoladas. Para  $k_p R = \pi$  a interação RKKY é antiferromagnética com  $J$  variando de 0.10 (AFM forte) a 0.20. Para  $k_p R = \pi/2$  a interação RKKY é ferromagnética. Os símbolos de cor azul referem-se as densidades espectrais pares e os de cor vermelha as ímpares.

## 4.2 – Regimes Assintóticos

### 4.2.1 – Regime Kondo

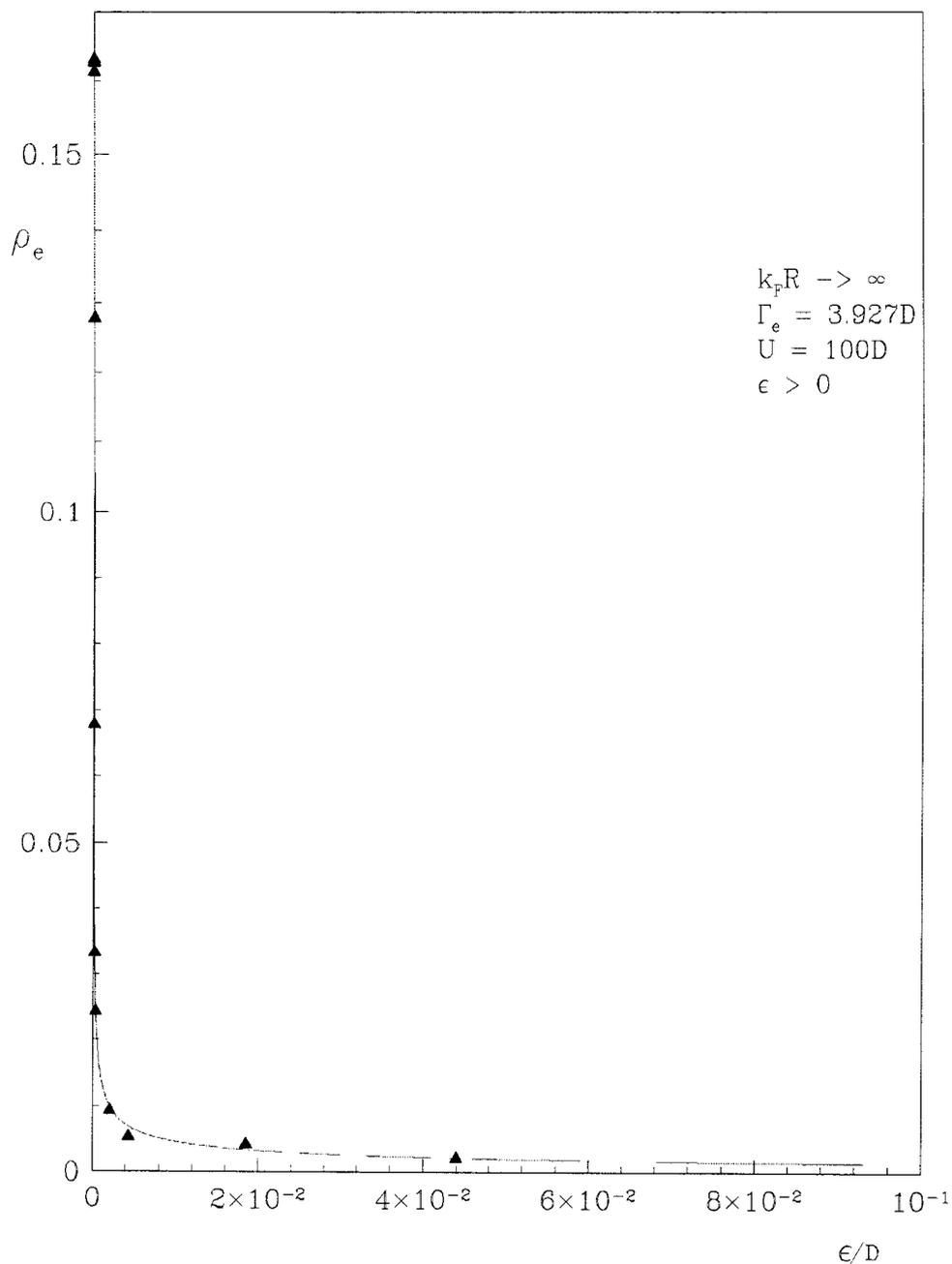
Neste regime a separação entre as impurezas é tão grande que o acoplamento entre elas é desprezível, reduzindo o problema a dois modelos de uma impureza. Na Fig.(4.2) a densidade espectral par em função da energia para  $k_F R \rightarrow \infty$  é apresentada. Os símbolos  $\blacktriangle$  são os nossos resultados numéricos e a linha cheia a expressão fenomenológica de Frota e Oliveira [20] para a ressonância Kondo,

$$\rho(\varepsilon) = \frac{2}{\pi\Gamma} \operatorname{Re} \left[ \frac{i\Gamma_K}{\varepsilon + i\Gamma_K} \right], \quad (4.1)$$

onde

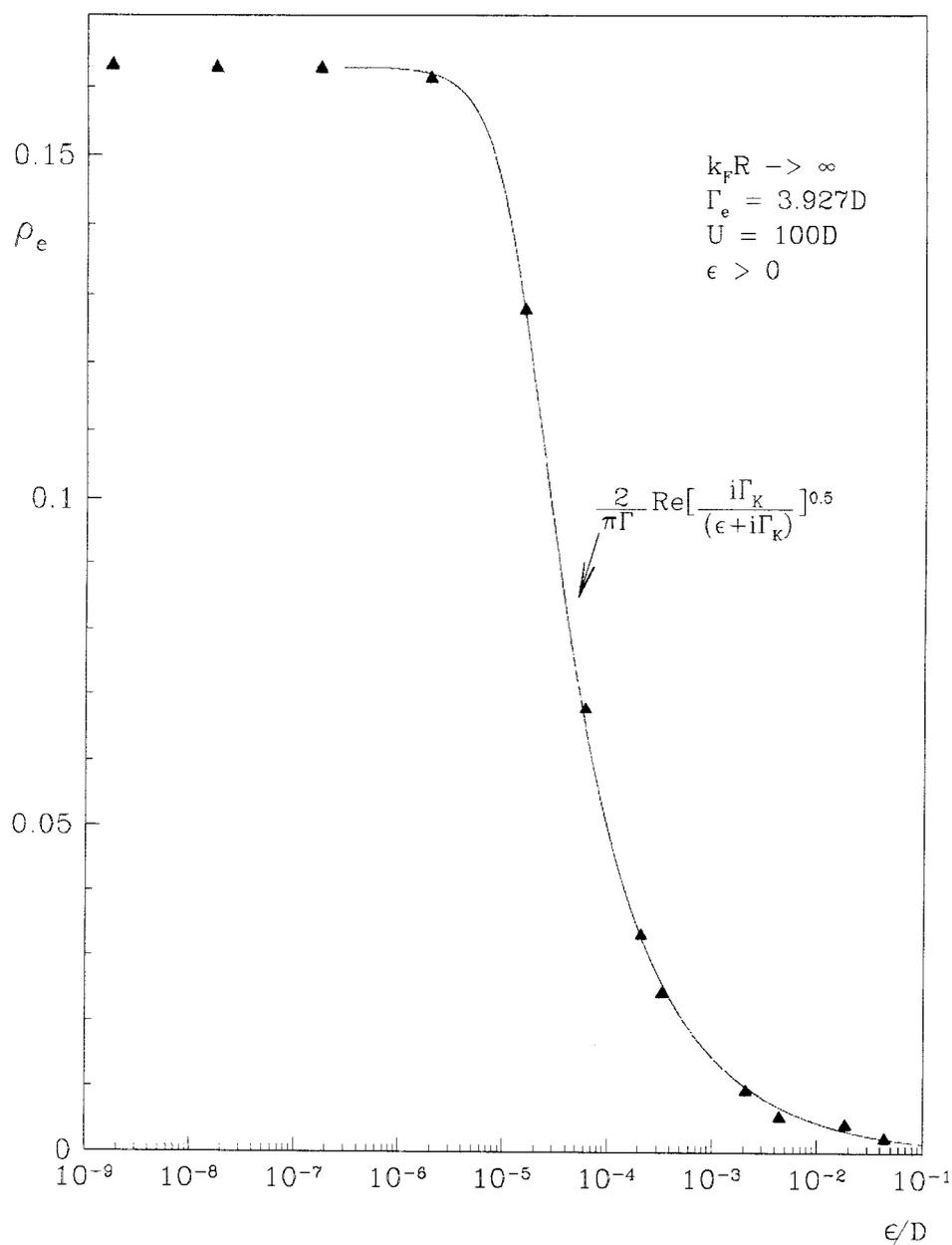
$$\Gamma_K = \frac{k_B T_K}{0.206\pi}. \quad (4.2)$$

Na Fig.(4.2)  $\Gamma = 3.927D$  e  $\Gamma_K = 1.6 \times 10^{-5}D$ , ligeiramente menor que o previsto pela Eq.(4.2) se considerar  $k_B T_K = 1.4 \times 10^{-5}D$  obtido no cálculo da susceptibilidade [13]. A discrepância está dentro do erro esperado para o cálculo de  $T_K$  a partir da susceptibilidade na Ref.[13].



**Figura 4.2** – Densidade espectral par em função da energia para  $k_F R \rightarrow \infty$ . Os símbolos ( $\blacktriangle$ ) são nossos resultados numéricos e a linha azul contínua é a equação da forma da ressonância Kondo proposta por Frota e Oliveira [20]. Os valores de  $U$  e  $\Gamma$  são dados no gráfico,  $\Gamma_K = 1.6 \times 10^{-5} D$ .

A largura da ressonância Kondo é muito estreita ( $\approx \Gamma_K$ ). Assim, na Fig.(4.3) apresentamos o resultado da Fig.(4.2) em escala logarítmica de energia.



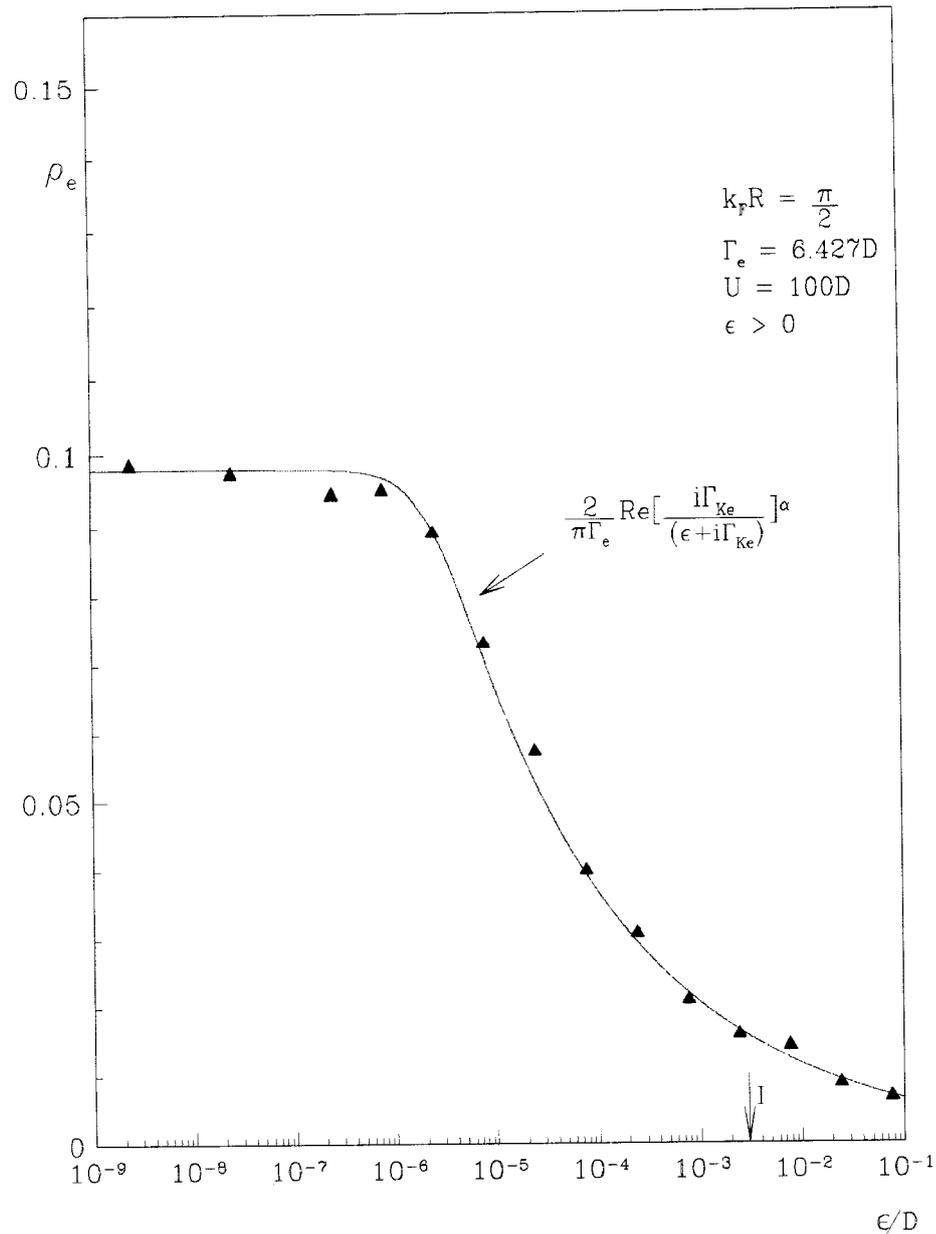
**Figura 4.3** – Densidade espectral par em escala logarítmica de energia para  $k_f R \rightarrow \infty$ . A linha azul contínua é a equação proposta por Frota e Oliveira [20] para a forma da ressonância Kondo, Eq.(4.1). Nossos resultados numéricos (▲) concordam muito bem com a equação. Os valores de  $U$  e  $\Gamma$  são dados no gráfico,  $\Gamma_k = 1.6 \times 10^{-5} D$ .

Todas as densidades espectrais neste regime são iguais à do modelo de uma impureza. A concordância de nossos resultados com a expressão analítica é muito boa e reforçam a precisão de nossos resultados.

## 4.2.2 – Regime Ferromagnético

O regime ferromagnético leva, para energias próximas de  $I$ , a formação de um estado tripleto entre as impurezas ( $S = 1$ ). É característico deste regime o efeito Kondo de dois estágios. Para  $\varepsilon \cong \Gamma_{ke}$  a banda de condução par, mais fortemente acoplada a impureza, reduz o spin da impureza de  $S = 1$  para  $S = 1/2$  e uma ressonância Kondo na densidade par é observada. Neste caso, não se conhece uma expressão analítica para a densidade espectral como no caso Kondo.

A Fig.(4.4) é o resultado obtido para a densidade espectral par em escala logarítmica de energia com  $k_F R = \pi/2$  e  $J = 0.1$ . Os resultados numéricos são os símbolos  $\blacktriangle$  e a linha contínua é uma expressão que ajusta à ressonância de Kondo.

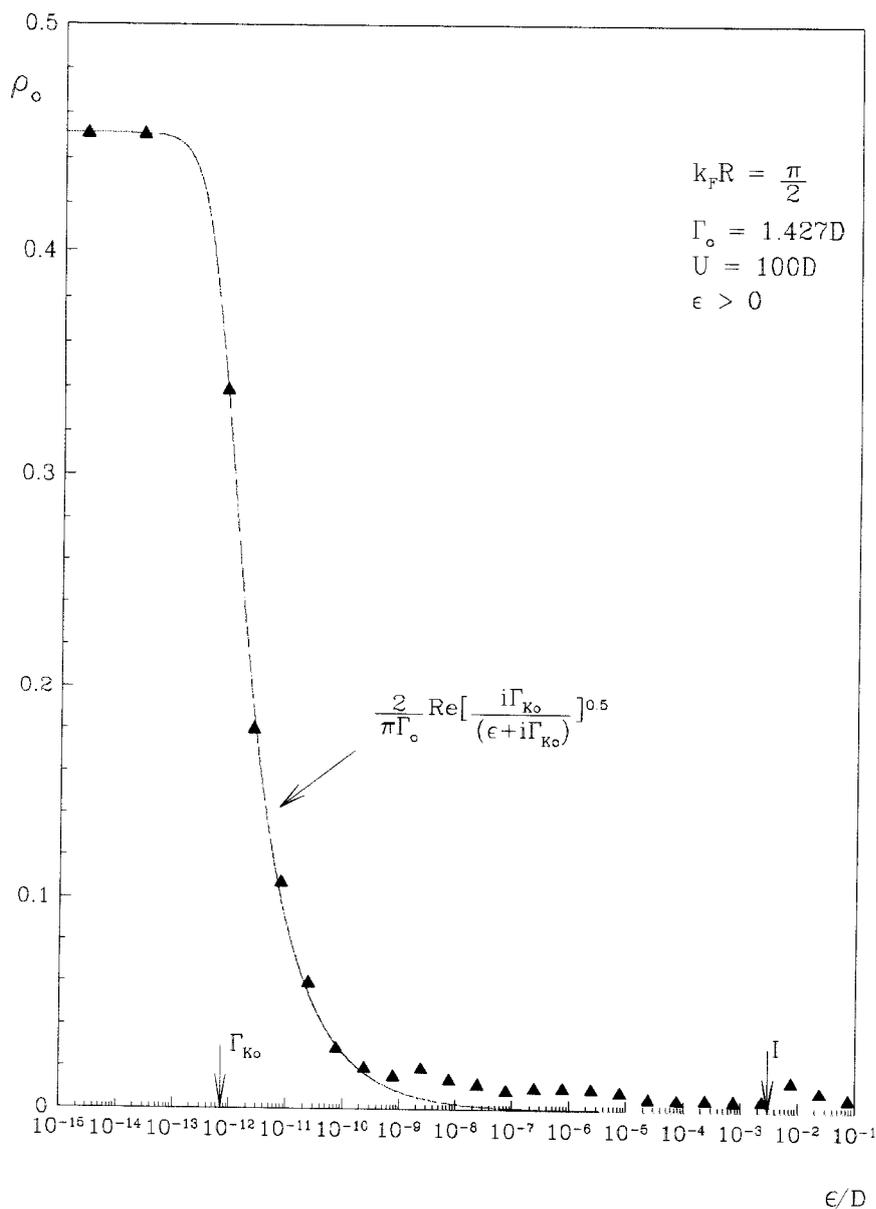


**Figura 4.4** – Densidade espectral par em escala logarítmica de energia para  $k_f R = \pi/2$ . Neste regime ocorre a formação do tripleto entre as impurezas para energias próximas de  $I$ . Não se observa um pico nesta região pois  $\Gamma_{Ke} \sim I$ . Para energias  $\epsilon \approx \Gamma_{Ke}$  a banda de condução par, mais fortemente acoplada as impurezas, reduz o spin da impureza de  $S=1 \rightarrow 1/2$  e realça a densidade par. Os valores de  $U$  e  $\Gamma_e$  são dados no gráfico,  $\Gamma_{Ke} = 0.27 \times 10^{-3} D$  e  $\alpha = 0.25$  são valores que ajustam a curva aos dados numéricos.

Para energias próximas de  $I$  espera-se observar transições entre os estados tripleto e o singlete formado pelas impurezas. No caso da densidade par, como  $\Gamma_{Ke} \sim I$ , esse efeito se superpõem ao efeito Kondo não sendo nitída a separação

entre os dois. Na densidade ímpar isso não acontece, podendo-se observar os dois efeitos distintamente.

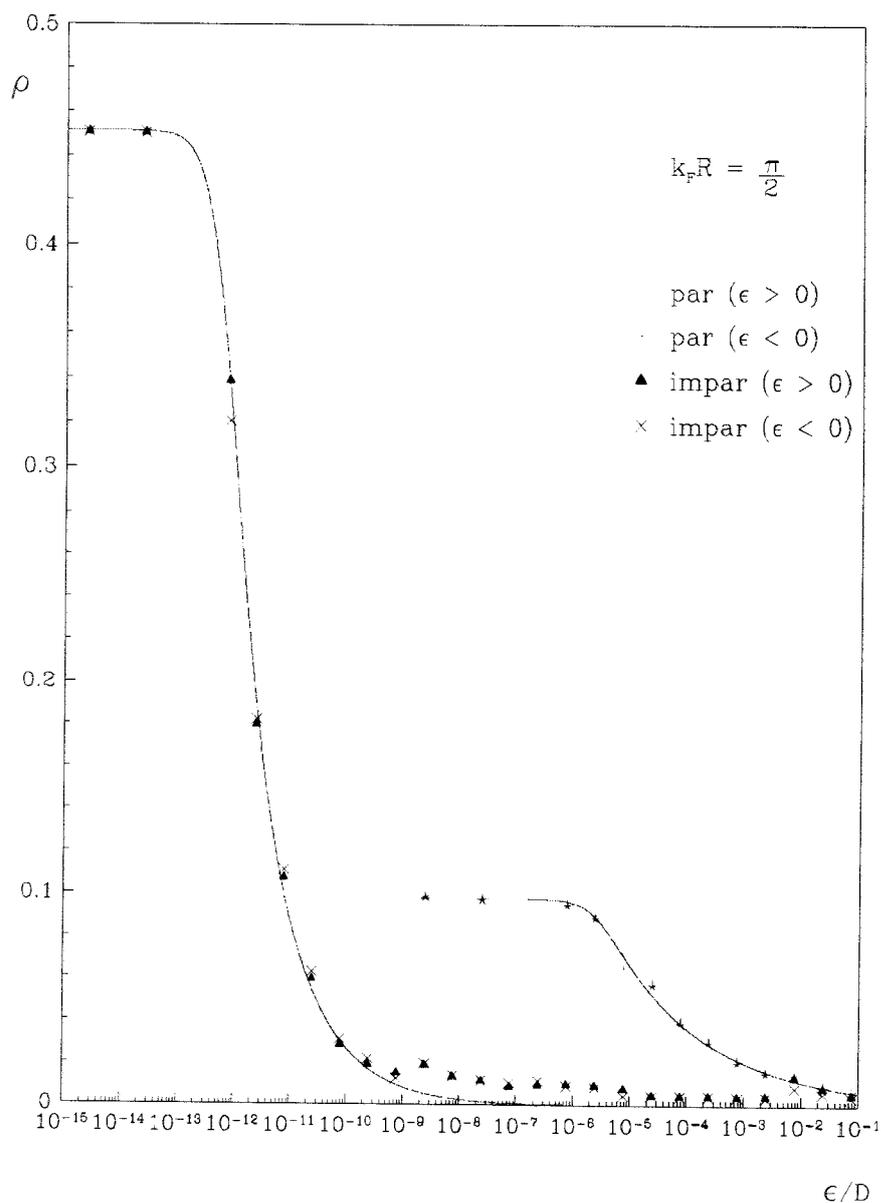
Diminuindo a energia, para  $\varepsilon \cong \Gamma_{Ko}$ , a banda de condução ímpar reduz o spin da impureza de  $S = 1/2$  para  $S = 0$  e na densidade ímpar para  $\varepsilon < \Gamma_{Ke}$  uma ressonância centrada no nível de Fermi é observada. Essa ressonância, igual a do regime Kondo, tem a forma dada pela Eq. (4.1). Na Fig.(4.5) a densidade espectral ímpar é apresentada em escala logarítmica de energia.



**Figura 4.5** – Densidade espectral ímpar em escala logarítmica de energia para  $k_f R = \pi/2$ . Após a redução do spin da impureza de  $S = 1 \rightarrow 1/2$  pela banda par a banda ímpar, para  $\epsilon \approx \Gamma_{k_o} = 0.7 \times 10^{-12}$ , reduz o spin de  $S = 1/2 \rightarrow 0$ , realçando a densidade ímpar para  $\epsilon \approx \Gamma_{k_o}$ . Neste caso, como  $\Gamma_{k_o} \ll I$ , observa-se o pico associado a separação entre tripleto e singleto para energias  $\epsilon \approx I$ . Embora incertezas relacionadas aos valores numéricos façam aparecer oscilações, para  $\epsilon \approx I$  ocorre um pico. Os valores de  $U$  e  $\Gamma_o$  são dados no gráfico,  $I (= 3 \times 10^{-3})$  e  $\Gamma_{k_o} (= 0.7 \times 10^{-12} D)$  estão indicados por setas.

Na Fig.(4.5) embora incertezas relacionadas aos valores numéricos façam aparecer oscilações temos evidências que, para energias  $\epsilon \approx I$ , ocorre um pico.

A Fig.(4.6) mostra as densidades espectrais par e ímpar, para  $\varepsilon > 0$  e para  $\varepsilon < 0$ . Como esperado, as densidades pares para  $\varepsilon > 0$  e  $\varepsilon < 0$  são iguais, o mesmo observa-se para as densidades ímpares. O efeito Kondo de dois estágios é realçado quando comparamos as densidades par e ímpar. Para  $\varepsilon \cong \Gamma_{Ke}$ , a ressonância aparece na densidade par, a densidade ímpar sendo insensível a ela. Para  $\varepsilon \cong \Gamma_{Ko}$  a ressonância Kondo realça a densidade ímpar, enquanto a par permanece inalterada.



**Figura 4.6** – Densidades espectrais par e ímpar ( $\varepsilon > 0$  e  $\varepsilon < 0$ ) em escala logarítmica de energia para  $k_p R = \pi/2$ . O efeito Kondo de dois estágios é realçado. Todos os parâmetros usados são os mesmos das Figs.(4.4) e (4.5).

Para  $\varepsilon \rightarrow 0$  o valor das densidades espectrais concordam muito bem com o valor dado pela Eq.(3.16). Aqui,  $\Gamma_e = 6.427$  e  $\Gamma_o = 1.427$ .

### 4.2.3 – Regime Antiferromagnético

O regime antiferromagnético leva, para energias próximas de  $I$ , a formação de um estado singleto entre as impurezas ( $S = 0$ ). No caso antiferromagnético forte as impurezas acopladas não afetam muito os elétrons de condução e a defasagem no nível de Fermi é próxima de zero.

A Fig.(4.7) mostra a densidade espectral par ( $\varepsilon > 0$ ). Para energias  $\varepsilon \approx I$  ocorrem transições entre o estado fundamental singleto com os estados associados às ressonâncias de Kondo que blindam a configuração tripleto. Em todas as densidades as curvas contínuas seguem, para  $\varepsilon > I$ , a lei de potência de Nozières e De Dominicis com coeficiente dado por

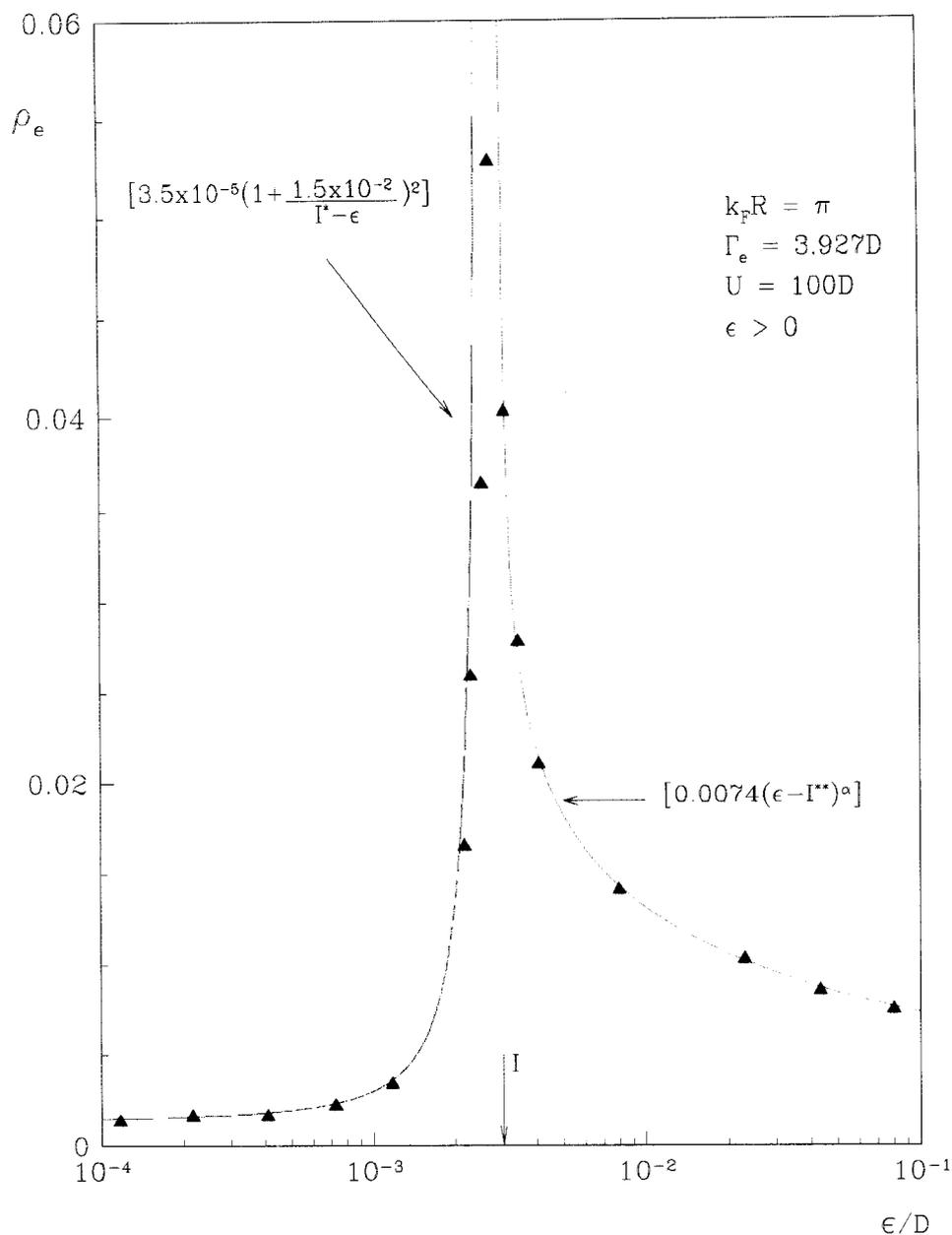
$$\alpha = 2\delta/\pi - 4(\delta/\pi)^2 \quad (4.3)$$

com,

$$\tan \delta = -\pi J = -\frac{\pi}{\ln\left(\frac{\varepsilon}{\gamma_K}\right)}, \quad (4.4)$$

onde  $\gamma_K \sim T_K$ .

Para  $\varepsilon < I$  seguem a Eq.(3.15), como apresentado na seção (3.2.2). Para  $\varepsilon \rightarrow 0$  a Eq. de Langreth estendida para o modelo de duas impurezas [Eq.(3.44)] fornece o valor da densidade espectral no nível de Fermi.

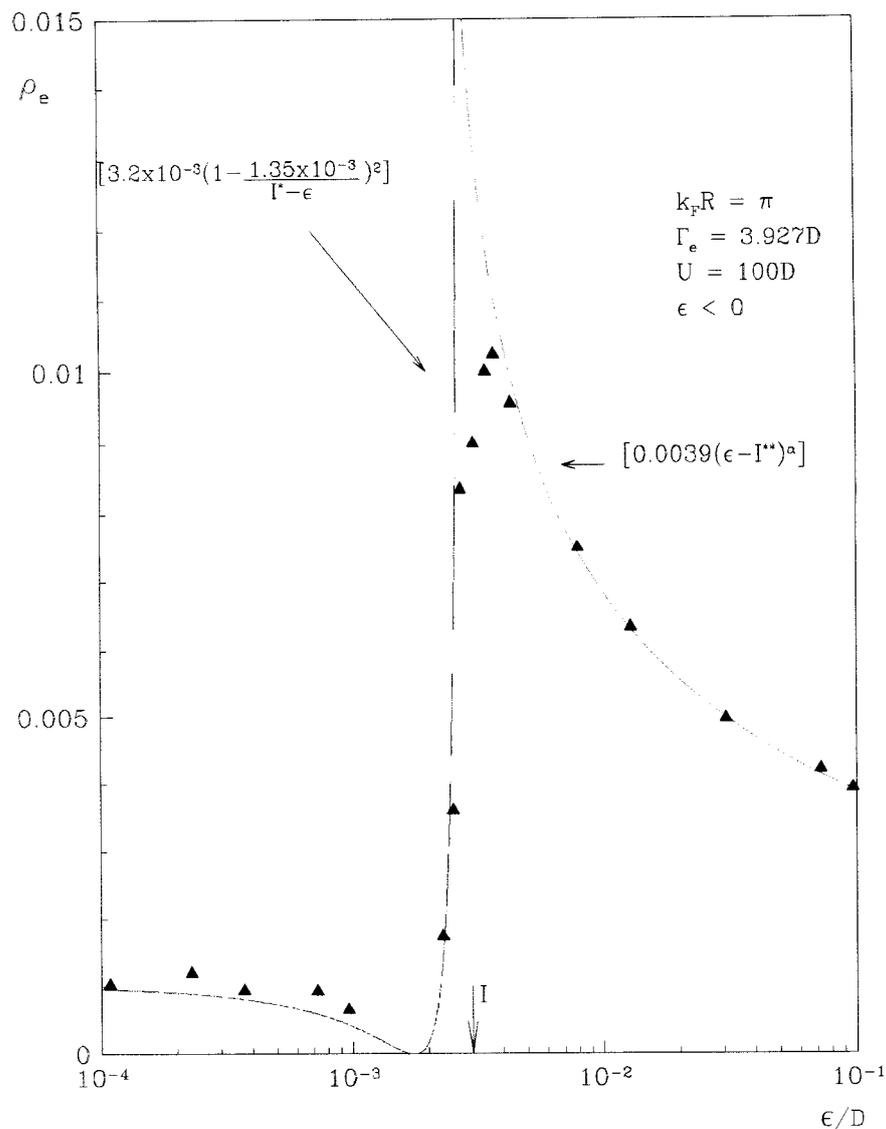


**Figura 4.7** – Densidade espectral  $\rho_\epsilon$  em escala logarítmica de energia para  $k_p R = \pi$  e  $\epsilon > 0$ . Os símbolos ( $\blacktriangle$ ) são nossos resultados numéricos. Para energias maiores que  $I$  o comportamento da densidade espectral segue a lei de potência de Nozières e De Dominicis, Eqs.(4.3) e (4.4). Para  $\epsilon < I$ , devido as transições virtuais a densidade espectral segue a Eq.(3.15). Os valores de  $\Gamma_e$  e  $U$  são dados no gráfico,  $I = 3 \times 10^{-3} D$  (indicado por uma seta),  $I^* = 2.8 \times 10^{-3} D$ ,  $I^{**} = 3 \times 10^{-3} D$ ,  $\gamma_x = 2 \times 10^{-5} D$ .

Os intervalos sem pontos numéricos que aparecem no gráfico podem ser diminuídos executando-se o código computacional com maior valor de energia limite.

No final do Apêndice II descrevemos algumas dificuldades relacionadas ao procedimento computacional que vieram à tona na interpretação dos resultados para o regime antiferromagnético.

A Fig.(4.8) mostra a densidade espectral par para  $\varepsilon < 0$ . As curvas contínuas são as mesmas que do caso anterior, com parâmetros ajustados para este caso. Observe como a altura do pico da Fig.(4.7) é maior que da Fig.(4.8), efeito devido à assimetria discutido na seção (3.2.2).

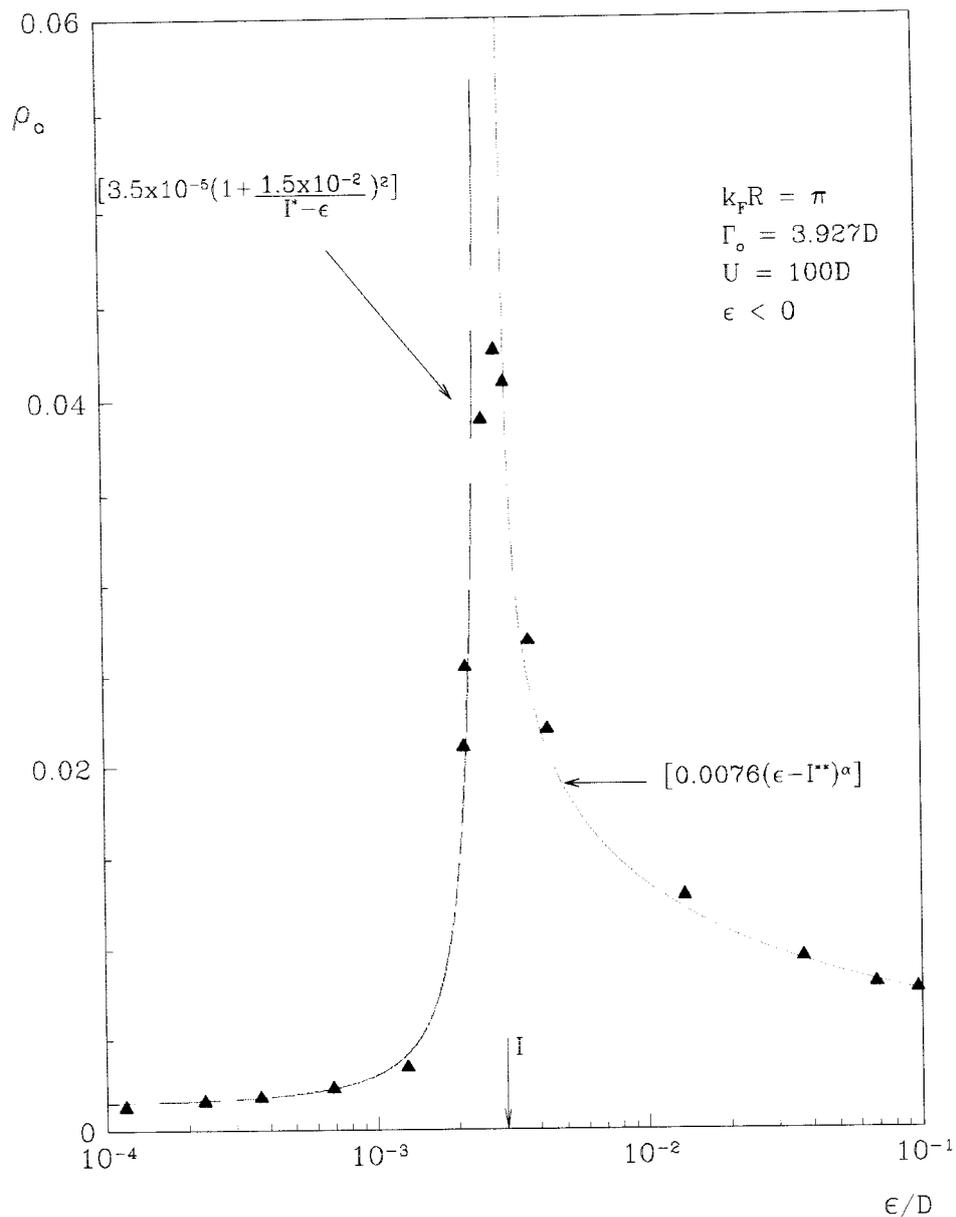


**Figura 4.8** – Densidade espectral par em escala logarítmica de energia para  $k_x R = \pi$  e  $\varepsilon < 0$ . Os símbolos ( $\blacktriangle$ ) são nossos resultados numéricos. Para energias maiores que  $I$  o comportamento da densidade espectral segue a lei de potência de Nozières e De Dominicis, Eqs.(4.3) e (4.4). Para  $\varepsilon < I$ , devido as transições virtuais a densidade espectral segue a Eq.(3.15). Os valores de  $\Gamma_e$  e  $U$  são dados no gráfico,  $I = 3 \times 10^{-3} D$ ,  $I^* = 3.1 \times 10^{-3} D$ ,  $I^{**} = 2.5 \times 10^{-3} D$ ,  $\gamma_x = 2 \times 10^{-5} D$ .

Comparando as Figs.(4.7) e (4.8) observa-se com facilidade, para  $\varepsilon < I$ , a característica discutida no Cap.III onde na Eq.(3.15) o termo de  $H_j$  pode tanto ser somado a  $\rho_0$  [Fig.(4.7)] quanto subtraído deste valor [Fig.(4.8)]. A Eq.(3.15) prevê, semelhante a antiressonância de Fano [48], que a densidade espectral se anule perto

de  $\varepsilon \approx I$ . Ela, porém, é baseada num cálculo de segunda ordem; termos de ordem superior eliminam esse zero na densidade espectral. Podemos assim entender a discrepância entre os valores numéricos e a expressão analítica na região em que esta se aproxima de zero.

A Fig.(4.9) mostra a densidade espectral ímpar para  $\varepsilon < 0$ .

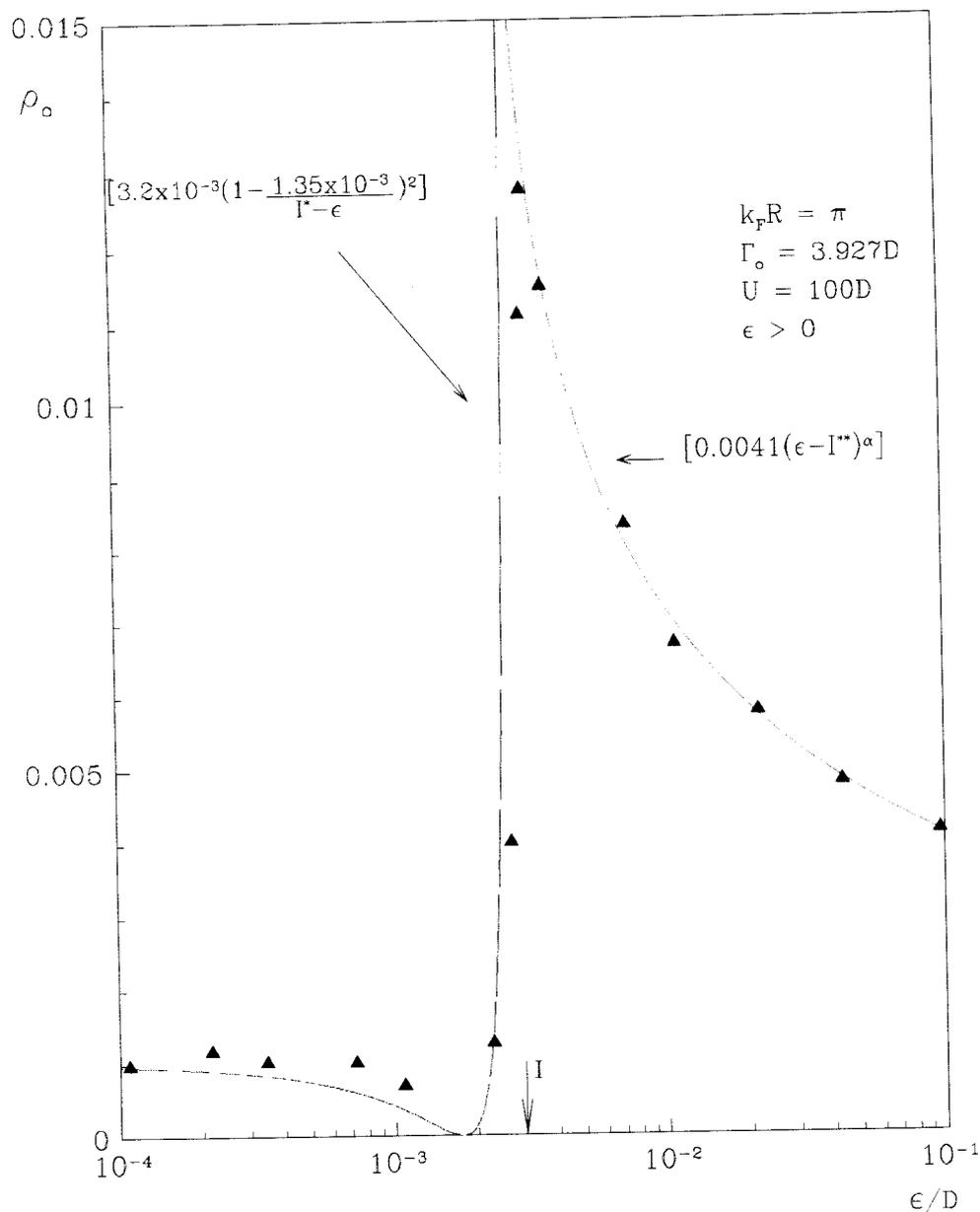


**Figura 4.9** – Densidade espectral ímpar em escala logarítmica de energia para  $k_p R = \pi$  e  $\varepsilon < 0$ . Os símbolos (▲) são nossos resultados numéricos. As curvas que aparecem nos gráficos são as mesmas da densidade par. Para energias maiores que  $I$  segue a lei de potência de Nozières e De Dominicis, para  $\varepsilon < I$  segue a Eq(3.15). Os valores de  $\Gamma_o$  e  $U$  são dados no gráfico, os valores de  $I$ ,  $I^*$ ,  $I^{**}$  e  $\gamma_x$  são os mesmos da Fig.(4.7).

Comparando as Figs. (4.7) e (4.9) observa-se que são iguais, isto é, a densidade espectral par para excitações tipo partícula é igual a densidade espectral ímpar para excitações do tipo buraco. Esta característica é esperada, como discutido

na seção (3.2.2), quando trocamos partícula por buraco no regime antiferromagnético.

A Fig.(4.10), semelhante à Fig.(4.8) como esperado, mostra a densidade espectral ímpar para  $\varepsilon > 0$ . O mesmo efeito, ocorrido na densidade par, relacionado a altura do pico comparando as Figs.(4.9) e (4.10) é observado.



**Figura 4.10** – Densidade espectral ímpar em escala logarítmica de energia para  $k_p R = \pi$  e  $\epsilon > 0$ . Os símbolos ( $\blacktriangle$ ) são nossos resultados numéricos. As curvas que aparecem nos gráficos são as mesmas da densidade par. Para energias maiores que  $I$  segue a lei de potência de Nozières e De Dominicis, para  $\epsilon < I$  segue a Eq(3.15). Os valores de  $\Gamma_o$  e  $U$  são dados no gráfico, os valores de  $I$ ,  $I^*$ ,  $I^{**}$  e  $\gamma_k$  são os mesmos da Fig.(4.8).

Sakai e co-autores [28], como apresentado no Cap.I, calcularam a densidade espectral para o modelo de Anderson de duas impurezas usando o GRN. O modelo destes autores difere do nosso por considerar acoplamentos independentes da energia entre impurezas e banda de condução, o que torna esses acoplamentos invariantes sob

transformação partícula-buraco. Para compensar essa invariância, eles adicionam ao Hamiltoniano termos que quebram a simetria partícula-buraco, estudando algumas situações que afastam o modelo da versão que aqui estamos interessados. O modelo mais próximo do estudado nesta tese é aquele que foi apresentado na Fig.(1.12), que difere do nosso apenas por ser simétrico.

Devido à simetria partícula-buraco, Sakai e colaboradores encontram que as densidades pares e ímpares coincidem. Como eles trabalham com pequenas repulsões Coulombianas ( $U = 0.8D$ ) seus gráficos [Fig.(1.12)] mostram a transição  $d^1 \rightarrow d^2$  ( $d^1 \rightarrow d^0$ ) que não aparece em nossos gráficos.

As densidades espectrais no regime ferromagnético [Fig.(1.12.a)] não se distinguem das do regime Kondo [Fig.(1.12.b)]. Nenhuma evidência da formação do tripleto e do efeito Kondo de dois estágios foi encontrada.

O regime antiferromagnético forte [Fig.(1.12.f)] apresenta resultados mais próximos dos encontrados nesta tese. Devido ao método de cálculo — convolução na escala logarítmica de energia — as densidades longe do nível de Fermi tendem a ser subestimadas: pode-se mostrar que a convolução a uma dada energia  $\varepsilon$  não consegue produzir densidades maiores que  $1/\varepsilon \ln \Lambda$ .

A discrepância entre os valores calculados na energia de Fermi e a expressão de Langreth, por outro lado, é atribuída pelos autores à limitada precisão numérica em seus cálculos. De fato, uma vez que os cálculos foram efetuados com  $\Lambda = 2$ , o custo computacional impede que os espectros sejam calculados com as energias de truncamento necessárias para alcançar precisão comparável com a exibida na Fig.(4.1).

## CONCLUSÕES

Neste trabalho, calculamos a densidade espectral para o modelo de Anderson de duas impurezas nos três regimes característicos: Kondo, ferro- e antiferromagnético. A simetria de inversão do modelo permitiu que calculássemos separadamente as densidades espectrais par e ímpar. Essa separação mostrou-se muito conveniente porque facilita a interpretação física dos resultados.

No regime Kondo, isto é, para impurezas tão afastadas que a interação RKKY é desprezível, o modelo de duas impurezas recai no modelo de uma impureza. Nossos resultados possuem boa concordância com os conhecidos na literatura [20,21]. Esses resultados serviram, principalmente, para testar a precisão do cálculo.

No regime ferromagnético, as impurezas se acoplam formando um tripleto que é, em seguida, blindado em dois estágios pelos elétrons de condução à medida que a energia abaixa. Para  $\varepsilon \approx \Gamma_{Ke}$  as densidades espectrais pares são realçadas, refletindo o efeito de blindagem da banda par no spin da impureza. Para  $\varepsilon \approx \Gamma_{Ko}$  as densidades ímpares destacam a segunda etapa do efeito Kondo.

No regime antiferromagnético, para energias da ordem da interação RKKY, as impurezas se acoplam formando um singlete. Nessa faixa de energias, as densidades espectrais mostram picos acentuados, indicando que os elementos de matriz de

fotoemissão acoplam o estado fundamental com os estados associados às ressonâncias de Kondo que blindam a configuração tripleto das impurezas. Para energias  $\varepsilon > I$  as densidades espectrais obedecem, como esperado, à lei de potência de Nozières e De Dominicis. Para  $\varepsilon < I$ , transições virtuais são responsáveis por uma contribuição residual que se aproxima de uma constante no limite  $\varepsilon \rightarrow 0$ .

Em resumo, os resultados numéricos além de confirmar os resultados encontrados em cálculos de propriedades termodinâmicas [13], fornecem a visão mais abrangente, até aqui encontrada, dos processos físicos envolvidos na competição entre as composições de momentos magnéticos que constituem a riqueza física do modelo de Kondo de duas impurezas.

Este trabalho foi a primeira explicação sistemática do modelo de Anderson no limite em que equivale ao modelo de Kondo. Algumas extensões deste estudo poderiam ser executadas com o código computacional já desenvolvido. Em particular, seria interessante estudar a versão simétrica do modelo. Um segundo prolongamento deste trabalho, semelhante ao que foi feito para propriedades termodinâmicas [13], pesquisaria a dependência da densidade espectral como função do parâmetro de assimetria  $\Delta$  [Eq.(2.15)].

Dada a quantidade de dados numéricos que podem ser extraídos do modelo assimétrico para cada valor de  $\Delta$ , achamos que tais estudos desfocalizariam o objetivo deste trabalho. Não resta dúvida, porém, sobre a importância que dados adicionais provenientes de tais estudos proporcionariam para a compreensão do modelo de Alexander e Anderson.

# APÊNDICE I

## TRIDIAGONALIZAÇÃO DA BANDA DE CONDUÇÃO

Neste apêndice apresentamos, resumidamente, o processo de tridiagonalização da banda de condução. Seguimos a prescrição feita por Lima [27].

A banda de condução numa base discreta tem a forma

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

onde  $a_m$  ( $m = 1, \dots, M$ ) são operadores de férmions e  $E_m$  energias arbitrárias que assumimos não degeneradas.

O acoplamento entre estados de condução e impureza é descrito pelo operador fermiônico  $f_0$  descrito na base  $a_m$  por

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

onde os  $\alpha_m$  devem ser todos diferentes de zero e o operador  $f_0$  normalizado,

$$\sum_m \alpha_m^2 = 1.$$

Queremos transformar o Hamiltoniano de condução, Eq. (AI.1), para a forma tridiagonal

$$H_{BC} = \sum_{n=0}^{M-2} [\theta_n f_n^+ f_n + t_n (f_n^+ f_{n+1} + h.c.)] + \theta_{M-1} f_{M-1}^+ f_{M-1}, \quad (\text{AI.3})$$

com  $f_0$  dado pela Eq.(AI.2).

Os novos  $M$  operadores fermiônicos  $f_n$  devem ser relacionados aos  $M$  operadores  $a_m$  por uma transformação unitária. Inicialmente somente  $f_0$  está definido. Embora as transformações para os operadores  $f_n$  possam ser derivadas não serão discutidas aqui onde nosso objetivo é calcular os coeficientes diagonais  $\theta_n$  ( $n = 0, \dots, M-1$ ) e codiagonais  $t_n$  ( $n = 0, \dots, M-1$ ), pois na prática são eles que necessitam ser determinados.

Determinamos tais coeficientes utilizando o formalismo das quadraturas Gaussianas. Fundamental neste formalismo é a definição do produto escalar dadas duas funções  $f$  e  $g$ , definidas no domínio da energia, sobre a função peso  $W$  como

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

A função peso deve ser normalizada,  $\int_{-\infty}^{\infty} W(\varepsilon) d\varepsilon = 1$ .

Para aplicar o formalismo das quadraturas Gaussianas em nosso problema precisamos definir um Hamiltoniano truncado

$$H_N = \sum_{n=0}^{N-2} [\theta_n f_n^+ f_n + t_n (f_n^+ f_{n+1} + h.c.)] + \theta_{N-1} f_{N-1}^+ f_{N-1} \quad (1 \leq N \leq M), \quad (\text{AI.5})$$

que deve coincidir com o Hamiltoniano da Eq. (AI.1) para  $H_N = H_M$ . Para todo  $N$  a forma quadrática de  $H_N$  pode ser representada por uma matriz  $\mathcal{H}_N$   $N \times N$  com elementos diagonais  $\theta_n$  ( $n = 0, \dots, M-1$ ) e codiagonais  $t_n$  ( $n = 0, \dots, M-1$ ) tal que

$$H_N = \sum f_i^+ [\mathcal{H}_N]_{ij} f_j. \quad (\text{AI.6})$$

Dada a matriz  $\mathcal{H}_N$  é fácil encontrar o polinômio característico  $P_N(\varepsilon) \equiv \det[\mathcal{H}_N - I\varepsilon]$  onde  $I$  é a identidade  $N \times N$ . Para  $N = 1$ , por exemplo,

$$P_1(\varepsilon) = \theta_0 - \varepsilon, \quad (\text{AI.7})$$

e assim podemos determinar os coeficientes  $\theta_N$  e  $t_{N-1}$  a partir dos polinômios característicos  $P_{N-1}$  e  $P_N$

$$\theta_N = \frac{\langle \varepsilon P_N | P_N \rangle}{\langle P_N | P_N \rangle}, \quad (\text{AI.8})$$

$$\text{e } t_{N-1}^2 = \frac{\langle P_N | P_N \rangle}{\langle P_{N-1} | P_{N-1} \rangle}. \quad (\text{AI.9})$$

Estas equações definem um procedimento recursivo para determinar todos os coeficientes diagonais e codiagonais.

Para  $N = 1$ , a matriz  $\mathcal{H}_1$  tem um único elemento,  $\mathcal{H}_1 = \varepsilon_0$ . Como, por definição,  $P_0(\varepsilon) = 1$  usando a Eq.(AI.8) temos

$$\theta_0 = \int_{-\infty}^{\infty} \varepsilon W(\varepsilon) d\varepsilon. \quad (\text{AI.10})$$

e podemos determinar o polinômio característico  $P_1(\varepsilon)$ , Eq.(AI.7).

Para  $N > 1$ , supomos que  $P_{N-1}$ ,  $P_N$ , e  $\mathcal{H}_N$  são conhecidos e, a partir da Eq.(AI.8) e da Eq.(AI.9), determinamos  $\mathcal{H}_{N+1}$  e conseqüentemente  $P_{N+1}$ . Fazendo isso, temos, duas equações que determinam  $\theta_N$  e  $t_{N-1}$ . Os outros coeficientes diferentes de zero da matriz  $\mathcal{H}_{N+1}$  já são conhecidos pois são elementos de  $\mathcal{H}_N$ . Assim, temos que, (i) construindo a matriz truncada  $\mathcal{H}_N$ , (ii) calculando seu polinômio característico  $P_N(\varepsilon)$ , e (iii) determinando  $\theta_N$  e  $t_{N-1}$  a partir da Eq.(AI.8) e da Eq.(AI.9) para  $N = 0, \dots, M-1$ , podemos determinar todos os coeficientes da banda de condução tridiagonal, Eq.(AI.3).

Para executar o processo recursivo descrito acima é necessário que se conheça a função peso adequada ao problema. Em nosso cálculo definimos a função peso como [27]

$$W(\varepsilon) = \sum_{m=1}^M \alpha_m^2 \delta(\varepsilon - E_m). \quad (\text{AI.11})$$

Na prática, apesar do procedimento descrito acima determinar os coeficientes  $\theta_N$  e  $t_N$ , utilizamos um procedimento um pouco diferente onde cada um dos coeficientes pode ser calculado independentemente.

A definição da função peso, Eq.(AI.11), reduz o  $n$ th momento da energia,

$$\phi_n = \langle \varepsilon^n | P_0 \rangle \quad (\text{AI.12})$$

para a soma de  $M$  termos

$$\phi_n = \sum_{m=1}^M E_m^n \alpha_m^2. \quad (\text{AI.13})$$

Na teoria das quadraturas Gaussianas, os polinômios característicos formam um conjunto ortogonal,  $\langle P_N | P_{N'} \rangle = 0$  ( $N, N' = 0, \dots, M; N \neq N'$ ). Em particular, para qualquer  $n$  ( $0 \leq n < N$ ), temos que  $\varepsilon^n$  é uma combinação linear de  $P_0, \dots, P_n$  e conseqüentemente ortogonal a  $P_N(\varepsilon)$  e podemos escrever as seguintes equações

$$\begin{aligned} \langle P_N | P_0 \rangle &= 0 \\ \langle P_N | \varepsilon \rangle &= 0 \\ &\vdots \\ \langle P_N | \varepsilon^{N-1} \rangle &= 0. \end{aligned} \tag{AI.14}$$

Cada uma dessas igualdades pode ser expandida, onde o polinômio  $P_N(\varepsilon)$  tem a forma

$$P_N(\varepsilon) = (-1)^N [\varepsilon^N + \gamma_1 \varepsilon^{N-1} + \dots + \gamma_N], \tag{AI.15}$$

onde  $\gamma_n$  ( $n = 1, \dots, N$ ) são constantes relacionadas com os coeficientes  $\theta_N$  e  $t_N$ , em particular

$$\gamma_1 = - \sum_{n=0}^{N-1} \theta_n. \tag{AI.16}$$

Usando a Eq.(AI.13) expandimos o sistema de Eq.(AI.14) encontrando um sistema de equações inhomogêneas de  $N$  variáveis  $\gamma_n$  ( $n = 1, \dots, N$ ) não conhecidas, que resolvemos usando a regra de Cramer. Encontramos que

$$\sum_{n=0}^{N-1} \theta_n = \frac{\tilde{\Delta}_N}{\Delta_N} \quad (1 \leq N \leq M), \tag{AI.17}$$

onde,

$$\Delta_N = \det \begin{bmatrix} \phi_0 & \cdots & \phi_{N-2} & \phi_{N-1} \\ \phi_1 & \cdots & \phi_{N-1} & \phi_N \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \phi_{N-1} & \cdots & \phi_{2N-3} & \phi_{2N-2} \end{bmatrix} \quad (\text{AI.18})$$

e

$$\tilde{\Delta}_N = \det \begin{bmatrix} \phi_0 & \cdots & \phi_{N-2} & \phi_N \\ \phi_1 & \cdots & \phi_{N-1} & \phi_{N+1} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \phi_{N-1} & \cdots & \phi_{2N-3} & \phi_{2N-1} \end{bmatrix} \quad (\text{AI.19})$$

e podemos escrever uma expressão explícita para os coeficientes diagonais  $\theta_N$

$$\theta_n = \frac{\tilde{\Delta}_{N+1}}{\Delta_{N+1}} - \frac{\tilde{\Delta}_N}{\Delta_N} \quad (1 \leq N \leq M), \quad (\text{AI.20})$$

que determina todos os  $\theta_N$  com exceção de  $\theta_0$  que é dado por  $\theta_0 = \phi_1$ .

Para calcular os coeficientes codiagonais é necessário acrescentar mais uma equação linear ao sistema acima, a Eq.(AI.9). Da mesma forma que descrito acima, encontramos um sistema de equações lineares inhomogêneas que resolvidas geram, para os coeficientes codiagonais  $t_n$ , a expressão

$$t_n = \frac{\sqrt{\Delta_{N+2}\Delta_N}}{\Delta_{N+1}} \quad (1 \leq N \leq M-2), \quad (\text{AI.21})$$

com  $\Delta_N$  definido pela Eq.(AI.18).

Concluindo, para determinar os coeficientes da transformação unitária da banda de condução da base diagonal  $a_m$  para a base tridiagonal  $f_m$  calculamos os momentos  $\phi_n$ , Eq.(AI.13), montamos e calculamos os determinantes  $\Delta_N$  e  $\tilde{\Delta}_N$ ,

Eq.(AI.18) e Eq.(AI.19), e finalmente os coeficientes  $\theta_N$  e  $t_N$  pela Eq.(AI.20) e Eq.(AI.21), respectivamente.

## APÊNDICE II

### CÓDIGO COMPUTACIONAL

#### AII.1 - Características gerais

Desenvolvido em linguagem C++, o código computacional segue os princípios de Programação Orientada para Objetos (POO) [38,39]. Um sistema POO é construído ao redor de um conjunto de classes que caracterizam o comportamento de todos os dados básicos do sistema. Entre as principais vantagens de se construir um sistema desse tipo podemos citar três que, para nós, são essenciais:

**1) O código é facilmente reaproveitável.** Uma vez implementado um tipo abstrato de dados (uma classe), ele pode ser utilizado em qualquer programa que precise manipular dados desse tipo, bastando ser corretamente utilizada sua interface pública. Em linguagens orientadas para objetos a interface para os métodos definidos em uma classe é especificada separadamente dos detalhes de implementação gerando um programa flexível. Com essas características, se quisermos modificar parte do código, por exemplo, para utilizar outro Hamiltoniano podemos utilizar toda a estrutura de classes já desenvolvida, coisa que em linguagens não orientadas para objetos (exemplos FORTRAN e C ) não é possível.

**2) O código é facilmente depurável.** Utilizando o conceito de classes temos maior segurança e rapidez ao depurar o código numérico.

**3) Uso de alocação e liberação dinâmica de memória.** Em C++, a alocação dinâmica de memória é feita através dos operadores *new* e *delete*. O operador *new* é utilizado para a alocação de espaço e o operador *delete* é usado para a liberação. Diferentemente de outras linguagens, por exemplo C, os tipos de dados a serem alocados por *new* podem ser tanto tipos pré-definidos da linguagem como tipos definidos pelo usuário. O cálculo da densidade espectral seria impraticável se não pudessemos utilizar artifícios como alocação e liberação dinâmica de memória.

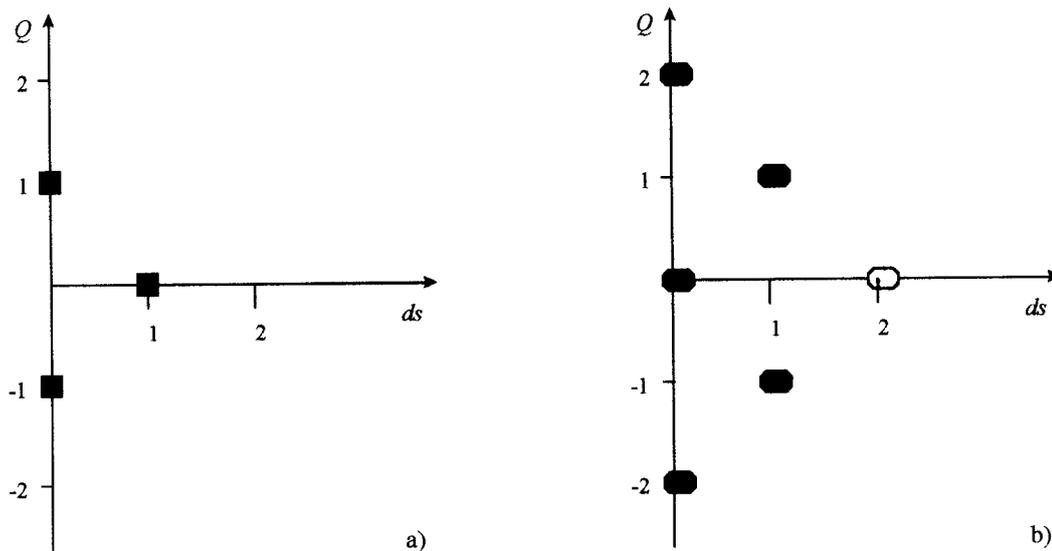
Uma classe é um tipo de dado definido pelo usuário. Na POO a ênfase é colocada na definição de tipos de dados, ou seja, na construção das classes. As classes permitem a definição de tipos de dados que apresentam não apenas as estruturas de armazenamento de dados, mas também as operações que podem ser efetuadas sobre esses dados. Assim, uma **classe** descreve o comportamento do tipo de dado definindo a interface para todas as operações que podem ser executadas por esse tipo básico. Qualquer variável do tipo da classe é chamada um **objeto** dessa classe. Uma classe pode **herdar** características de outra classe. A classe que herda as características é chamada **classe derivada**, e a classe da qual as características foram herdadas é chamada **classe base**. A classe derivada pode acrescentar novas características à classe base, ou alterar as características já existentes para melhor se adaptarem ao novo tipo, ou simplesmente reutilizar as características já existentes inalteradas.

A seguir, descrevemos algumas características específicas do código numérico.

## AII.2 - Características específicas

Nosso código contém várias classes. Entre as principais encontram-se as classes: *Sector*, *Primitive*, *Eigen*, *Invar* e *Outcd*. Outras duas classes, não menos necessárias porém conceitualmente distintas das demais, complementam o código. São elas: *Data* e *Lanczos*. Todo o funcionamento do código diz respeito a essas classes que passamos a descrever.

**Sector** : O Hamiltoniano de Anderson de duas impurezas apresenta leis de conservação - de carga ( $Q$ ), spin ( $S$ ) e paridade ( $p$ ) - que podem (e devem) ser exploradas na sua diagonalização. Rotulam-se assim os estados através de seus números quânticos  $Q, S, p$ . Como não há elementos de matriz entre estados com diferentes números quânticos, a diagonalização é feita em cada subespaço  $(Q, S, p)$  que denominaremos **setor**. Desta maneira, um setor é caracterizado por sua carga, spin e paridade e contém todas as informações necessárias para ser diagonalizado bem como sua contribuição às propriedades físicas a serem calculadas. Na Fig.(AII.1) esquematizamos um gráfico de carga ( $Q$ ) versus spin ( $2S$ ) mostrando os setores existentes na fase alta (a) e na fase baixa (b) da iteração  $N = -1$ . A iteração  $N = -1$  é fácil de se entender e oferece motivação física. Definido apenas pelas duas impurezas (sem a presença dos operadores da banda de condução) o Hamiltoniano  $H_{-1}$  pode ser diagonalizado analiticamente. Para trabalhar somente com números quânticos inteiros, multiplicamos o spin por 2, definindo assim o número quântico  $2S$ .



**Figura AII.1** - a) Setores [subespaços  $(Q, 2S, p)$ ] da fase alta da iteração  $N = -1$ . Todos os setores são pares ( $p = 0$ ). b) Setores da fase baixa da iteração  $N = -1$ . A cor amarela identifica pares  $(Q, 2S)$  associados só com setores ímpares, a verde os associados só com setores pares, e a azul os pares  $(Q, 2S)$  para os quais existem tanto setores pares como ímpares.

Essa definição de setor gera o que chamamos de *class Sector*. Um objeto da *class Sector* possui todas as informações referentes ao setor podendo ser referenciado durante todo o programa. Outro dado membro da *class Sector* é a *atividade* do setor; dizemos que a atividade de um setor é *ON* se ele é construído na fase em que a execução se encontra e *OFF* caso contrário. Embora os setores *OFF* não precisem ser diagonalizados (eles já foram diagonalizados na fase anterior, quando estavam *ON*) a informação neles contida sobre seus autovalores e autovetores é essencial para a construção dos estados primitivos na próxima fase do processamento; por isso, a manutenção dos setores *OFF* é tão importante quanto a dos setores *ON*. Por exemplo, quando estivermos na fase baixa da iteração -1, o setor  $(0, 1, 0)$  está *OFF* enquanto que  $(0, 0, 0)$  está *ON*. Podemos observar, na Fig.(AII.1) (superpondo AII.1a e AII.1b), que ao final da fase baixa da iteração  $N = -1$  teremos no total 12

setores disjuntos, 3 *OFF* e 9 *ON*. Cada setor *OFF* é rodeado por setores *ON*, o conjunto dos setores *OFF* e *ON* formam um rede bipartite, como um tabuleiro de xadrez.

**Primitive** : Dado um setor, então, é necessário construir seus elementos de matriz e diagonalizá-lo. Para tal, é necessário gerar a base primitiva e nesta base montar os elementos de matriz. Apoiados nesta idéia, definimos a *class Primitive*, que derivada da *class Sector* é responsável pelo cálculo dos elementos de matriz do setor  $(Q, ds, p)$ , sua diagonalização e armazenamento dos autovalores e autovetores.

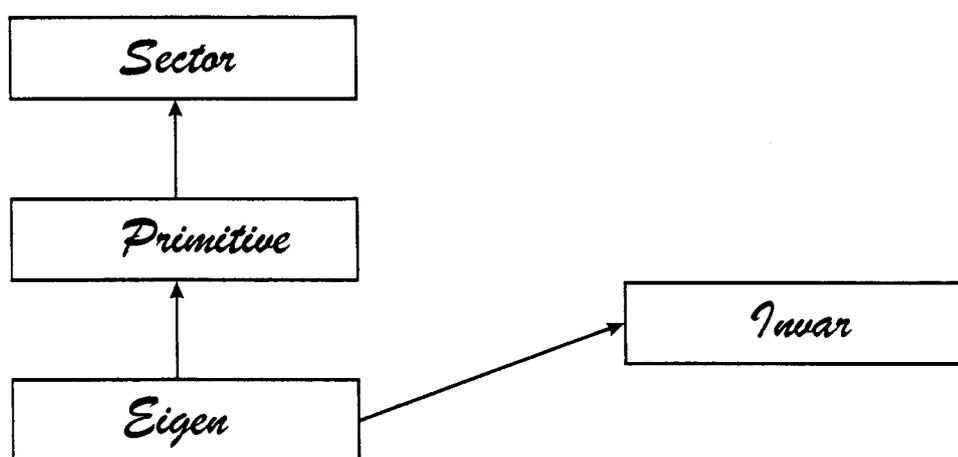
**Eigen** : Após diagonalização, obtém-se a base própria na qual devem ser calculados os elementos de matriz invariantes e as propriedades físicas desejadas. Definimos então a *class Eigen*, derivada da *class Primitive*, que executa a chamada do cálculo dos invariantes e os armazena.

**Invar** : Os elementos de matriz invariantes apresentam também uma estrutura típica de classe e assim definimos a *class Invar*, responsável pelo cálculo dos invariantes ativos e passivos de um determinado setor, em uma dada fase do cálculo. A *class Eigen* contém uma matriz de ponteiros do tipo *Invar* onde armazena os elementos de matriz invariantes para os operadores fermiônicos  $f_N^+$  e  $c_d^+$ . Os primeiros são necessários para se construir a matriz Hamiltoniana na próxima fase do processamento; os invariantes de  $c_d^+$ , por sua vez são necessários para se calcularem as densidades espectrais.

No código computacional, os símbolos  $F_{NE}$  e  $F_{NW}$  se referem aos elementos de matriz invariantes  $\langle Q+1, ds+1, p', r' \| f_N^+ \| Q, ds, p, r \rangle$  e  $\langle Q+1, ds-1, p', r' \| f_N^+ \| Q, ds, p, r \rangle$ , respectivamente. O acrônimo *NE* se refere à

direção Nordeste em que o setor  $(Q + 1, ds + 1, p')$  se encontra em relação ao setor  $(Q, ds, p)$  em diagramas como os da Fig.(AII.1). Da mesma forma *NW* se refere à direção Noroeste em que o setor  $(Q + 1, ds - 1, p')$  se encontra em relação a  $(Q, ds, p)$ . Os mesmos subíndices definem os símbolos  $C_{NE}$  e  $C_{NW}$ , que designam os elementos de matriz invariantes  $\langle Q+1, ds+1, p', r' \| c_a^+ \| Q, ds, p, r \rangle$  e  $\langle Q+1, ds-1, p', r' \| c_a^+ \| Q, ds, p, r \rangle$ , respectivamente. Essa metáfora geográfica é explorada no desenvolvimento de todo código numérico.

Na Fig. (AII.2) esquematizamos a relação hierárquica entre as principais classes



**Figura AII.2** - Relação hierárquica entre as classes. *Eigen* é uma classe derivada de *Primitive* que é derivada de *Sector* e contém quatro vetores do tipo *Invar*. A classe *Sector* contém os números quânticos  $Q, ds, p$ . A classe *Primitive* contém a matriz Hamiltoniana do setor e seus autovalores e autovetores. Finalmente a classe *Eigen* contém objeto do tipo *Invar* que armazenam os elementos de matriz invariantes.

Observe que um objeto do tipo *Eigen* é capaz de herdar o que precisa para ser chamado de setor próprio, ou seja, conhece seu rótulo  $(Q, ds, p)$  herdado da class *Sector*, seus autovalores e autovetores herdados da class *Primitive* e os elementos de matriz invariantes da class *Invar*. Na prática, utilizamos um objeto do tipo *Eigen* que

é uma matriz de ponteiros para *Eigen*,  $sectors[ q ][ ds ][ p ]$ . Assim, dado  $Q$ ,  $ds$  e  $p$ , a matriz  $sectors[ q ][ ds ][ p ]$  aponta para o setor podendo acessar funções que manipulam os dados das classes *Eigen*, *Primitive* e *Sector*. Essa matriz, assim, proporciona um quadro sinótico que ajuda a depurar o programa e a interpretar a física dos resultados. Como ilustração, indicamos na Tab.(AII.1) os elementos da matriz  $sectors[ q ][ ds ][ p ]$  que não são nulos ao final da iteração  $N = -1$ . Note que estes elementos não são números mas sim estruturas e não podem ser enumerados aqui.

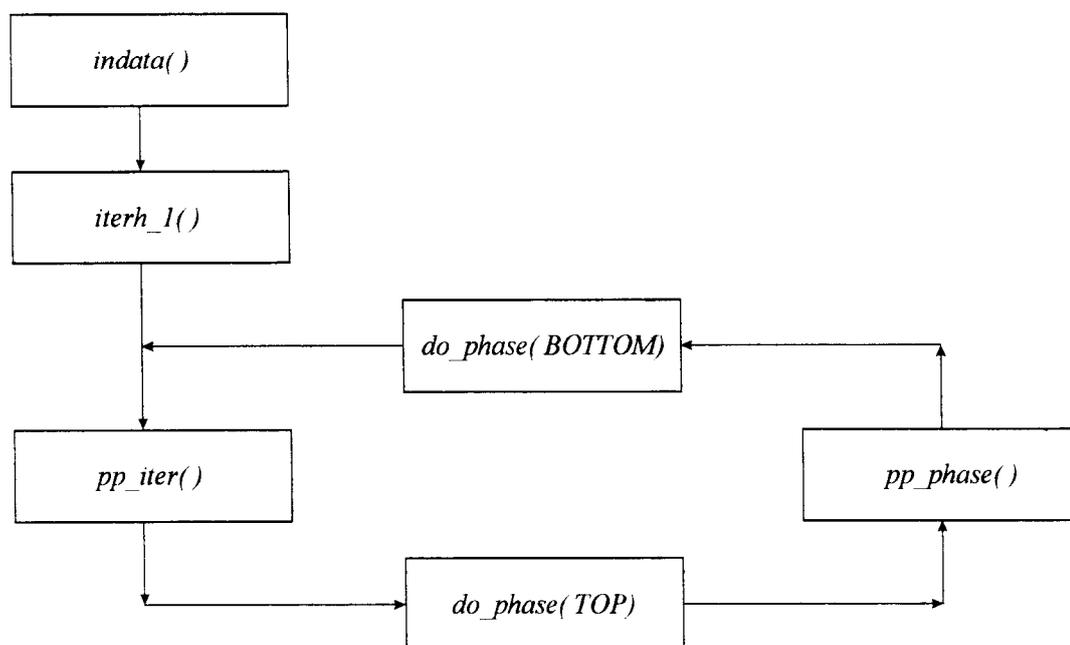
	$ds = 0$	1	2
$Q = 2$	X		
1	O	X	
0	X	O	
-1	O	X	
-2	X		

**Tabela AII 1** - Representação da matriz  $sectors[ q ][ ds ][ p ]$  mostrando os setores nela contidos ao final da iteração  $N = -1$ . Os círculos vermelhos identificam setores da fase alta ( $p = 0$ ); as cruzes (X) correspondem a setores da fase baixa, (verde  $\rightarrow p = 0$ ; amarelo  $\rightarrow p = 1$ ; azul  $\rightarrow p = 0$  e 1). Os elementos dessa matriz não são números, mas sim estruturas contendo números quânticos, autovalores, autovetores, elementos de matriz invariantes e outras informações - grandes demais para serem detalhadas nesta tabela.

Cabe aqui ressaltar as vantagens em se criar um sistema POO. Toda a estrutura das classes *Sector*, *Primitive*, *Eigen* e *Invar* são reaproveitáveis em problemas que envolvam Hamiltonianos semelhantes ao de Anderson de duas impurezas necessitando de mudança apenas as funções de mais baixo nível de programação. A depuração do código é rápida e fácil. Trabalhamos com cada um dos setores ( $Q, ds, p$ ) separadamente assim, a impressão de um objeto da *class Eigen* fornece todos os seus dados, desde  $Q, ds, p$  até os elementos de matriz invariantes. A alocação e liberação de memória é facilitada uma vez que criado o setor, através da

alocação do ponteiro da matriz  $sectors[q][ds][p]$ , aloca-se o espaço necessário para armazenar os dados de *Eigen*, *Primitive*, *Sector* e *Invar* . Quando o setor torna-se desnecessário apagamos o ponteiro para *sectors* que desencadeia toda a liberação de memória alocada a esse setor.

Uma vez conhecida a estrutura de classes do programa cabe então detalhar um pouco mais seu funcionamento. O programa principal [ *main( )* ], para melhor entendimento, é esquematizado na Fig.(AII.3).



**Figura AII.3** - Representação esquemática do procedimento computacional. Após a entrada de dados [*indata( )*] executa-se a iteração  $N = -1$  [*iterh\_1( )*], semente de todo o processo iterativo. A seguir de as fases alta e baixa [*do\_phase( )*] são executadas sucessivamente até  $N$  máximo.

Ao iniciar o programa, a função *indata( )*, executa a leitura dos dados. Essa leitura utiliza outra de nossas classes, a *class Data*. Como existem vários parâmetros a serem lidos que seguem uma mesma estrutura - todos tem um nome, um valor lido e muitos deles, um valor processado - definimos a *class Data*. Por exemplo, ao ler o

valor de  $U$  (repulsão Coulombiana entre elétrons no orbital da impureza) de um arquivo associamos a ele um nome e um valor, para utilizar esse valor no Hamiltoniano iterativo devemos multiplicar esse valor pelo fator  $2/(1 + \Lambda^{-1})$  e a isso chamamos valor processado ou *data\_til*. Isso se repete para  $V$ ,  $\varepsilon_d$  e outros parâmetros, o que confirma a necessidade de uma classe. Como esses valores podem ser variáveis do tipo *int* (por exemplo  $A$ ) ou do tipo *double* ( $z$ ), definimos *class Data* como *template*. Um *template* permite trabalhar com diversos tipos básicos de variáveis (*int*, *double*, *char*) sem necessitarmos redefinir a classe ou função para esse tipo básico.

A seguir inicia-se a iteração  $N = -1$ . É importante ressaltar que a iteração  $N = -1$  é uma iteração especial, que é semente para todo processo iterativo. Duas alternativas seriam possíveis aqui (i) armazenar os autovalores, autovetores e elementos de matriz invariantes necessários para construir  $N = 0$ , já calculados analiticamente ou, (ii) instruir o programa a construir as matrizes Hamiltonianas desde a fase alta de  $H_{-1}$ . Optamos pela segunda possibilidade. Com isso somos capazes de comparar os resultados do código numérico com os obtidos analiticamente, tanto para a fase alta quanto para a fase baixa de  $N = -1$ , pois são os mais simples visto que possuem apenas 3 e 9 setores, respectivamente [veja Fig.(AII.1.a) e Fig(AII.1b)]. Essa escolha, por sua vez, implica na definição de classes específicas - *Primitive\_1* e *Eigen\_1* descendentes de *Sector* e semelhantes a *Primitive* e *Eigen* - que serão usadas nas fases alta e baixa da iteração  $N = -1$ .

Concluída a fase baixa da iteração  $N = -1$  inicia-se o processo iterativo. A função *pp\_iter()*, cujo nome é seguido pela notação  $++i$ , que em C e C++ significa  $i \rightarrow i + 1$ , prepara o programa para uma nova iteração, nisso incluindo-se (i)

aumentar  $q_{max}$ ,  $ds_{max}$ ; (ii) mudar o valor de  $z$ ; (iii) trocar a atividade dos setores existentes e descartar os que não forem mais necessários. Por exemplo, o setor (1, 0, 0) é *ON* na fase alta da iteração -1, ao iniciar a fase baixa passa a *OFF* e ainda é utilizado. Ao iniciar a iteração  $N = 0$  não será mais utilizado e pode ser descartado.

A função *do\_phase(TOP)* executa a fase alta inicializando os setores (*do\_sector(q, ds, p, atividade)*) e calculando os elementos de matriz invariantes (*invariants()*). Aqui será utilizada outra de nossas classes ainda não explicada, a *class Lanczos*. *Lanczos* é uma classe utilizada na leitura dos coeficientes diagonais  $\theta_{N+1}$  e codiagonais  $t_N$  que serão usados para calcular os elementos da matriz  $H_{N+1}$ .

A função *pp\_phase()*, semelhante à *pp\_iter()*, prepara o programa para uma nova fase.

Por fim, *do\_phase(BOTTOM)* executa a fase baixa da iteração  $N$ .

O processo de liberação de memória é feito durante o decorrer de todo processo iterativo e não só em seu final. A medida que valores armazenados não são mais utilizados são apagados da memória deixando espaço de memória livre para nova alocação dinâmica. Por exemplo, após calcular para um determinado setor ( $q$ ,  $ds$ ,  $p$ ) os elementos de matriz invariantes ativos e atualizar os elementos de matriz invariantes passivos são descartados os autovetores na direção *NW*, ou seja, autovetores de setor ( $q + 1$ ,  $ds - 1$ ,  $p$ ) que não serão mais úteis. O mesmo ocorre com os demais vetores e matrizes alocados dinamicamente.

Como definido no Cap. III as densidades espectrais par(+) e impar(-) que queremos calcular são definidas à temperatura zero por

$$\rho_{+,-}^z(\varepsilon) = \int_{z_0}^{z_0+1} \rho_{+,-}^z(\varepsilon) dz \quad (\text{AII.1})$$

onde,  $\rho_{+,-}^z(\varepsilon)$  são definidas como

$$\rho_{+,-}^z(\varepsilon) = \begin{cases} \sum_f |\langle f | c_{a1} \pm c_{a2} | \Omega \rangle|^2 \delta(\varepsilon + E_f^z - E_\Omega^z) & (\varepsilon < 0) \\ \sum_f |\langle f | c_{a1}^\pm \pm c_{a2}^\pm | \Omega \rangle|^2 \delta(\varepsilon - E_f^z + E_\Omega^z) & (\varepsilon > 0) \end{cases}, \quad (\text{AII.2})$$

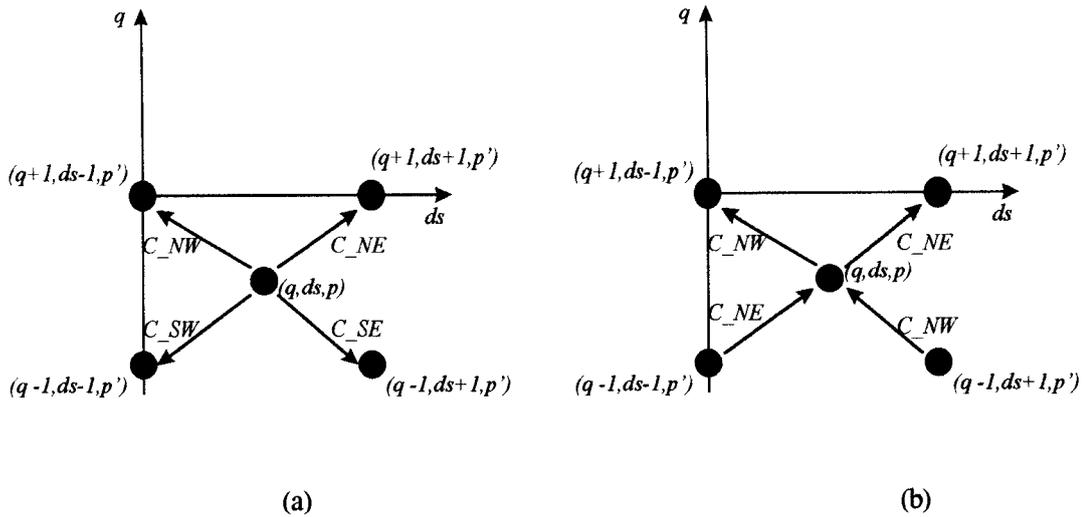
com  $|\Omega\rangle$  sendo o estado fundamental e  $|f\rangle$  os estados finais.

Iniciamos o cálculo numérico da densidade espectral calculando os elementos de matriz da Eq.(AII.2). Fazendo uso do teorema de Wigner-Eckart, os elementos de matriz  $\langle f | c_{dp} | \Omega \rangle$  e  $\langle f | c_{dp}^+ | \Omega \rangle$  são escritos em termos de elementos de matriz invariantes  $\langle f \| c_{dp} \| \Omega \rangle$  e  $\langle f \| c_{dp}^+ \| \Omega \rangle$ , respectivamente. Os elementos de matriz invariantes  $\langle q+1, ds+1, p', r' \| c_a^+ \| q, ds, p, r \rangle$  e  $\langle q+1, ds-1, p', r' \| c_a^- \| q, ds, p, r \rangle$  são denotados no código pelos símbolos  $C_{NE}$  e  $C_{NW}$ .

Aos demais elementos de matriz invariantes,  $\langle q-1, ds+1, p', r' \| c_a \| q, ds, p, r \rangle$  e  $\langle q-1, ds-1, p', r' \| c_a \| q, ds, p, r \rangle$ , necessários para calcular as densidades espectrais para  $\varepsilon < 0$ , associamos os símbolos  $C_{SE}$  e  $C_{SW}$ . Da mesma maneira que os anteriores, o subíndice  $SE$  refere-se à direção Sudeste em que o setor  $(q-1, ds+1, p')$  se encontra em relação ao setor  $(q, ds, p)$  e,  $SW$  refere-se à direção Sudoeste em que o setor  $(q-1, ds-1, p')$  se encontra em relação ao setor  $(q, ds, p)$ . A Fig.(AII.4a) ilustra essa estrutura.

Note-se que os elementos  $C_{SE}$  e  $C_{SW}$  não precisam ser calculados, já que são hermitianos conjugados dos elementos  $C_{NW}$  e  $C_{NE}$  rotineiramente computados. Uma vez que o cálculo dos elementos invariantes é computacionalmente dispendioso ao calcular somente os elementos nas direções  $NE$  e  $NW$  economizamos cerca de 30% do tempo e 40% da memória que da outra forma iríamos gastar.

A Fig.(AII.4b) explica esse procedimento. Ela representa a estrutura que seguimos, ou seja, a cada setor calculamos somente os  $C_{NE}$  e  $C_{NW}$ . O elemento de matriz invariante  $C_{SW}$  é o hermitiano conjugado do elemento  $C_{NE}$  e,  $C_{SE}$  o hermitiano conjugado de  $C_{NW}$ . Considerando o setor  $(q, ds, p)$  o estado fundamental  $|\Omega\rangle$  os setores  $(q + 1, ds + 1, p')$ ,  $(q + 1, ds - 1, p')$ ,  $(q - 1, ds + 1, p')$ ,  $(q - 1, ds - 1, p')$  representam os estados finais  $\langle f|$ . Comparando a Fig.(AII.4b) com a Fig.(AII.4a) observamos que o elemento de matriz invariante  $C_{SW} = \langle q - 1, ds - 1, p', r' \| c_a \| q, ds, p, r \rangle$  da Fig.(AII.4a) é equivalente ao elemento de matriz invariante  $C_{NE} = \langle q, ds, p, r \| c_a^+ \| q - 1, ds - 1, p', r' \rangle$  da Fig.(AII.4b), como esperado. O mesmo raciocínio é válido para  $C_{SE}$  e  $C_{NW}$ .



**Figura AII.4** - a) Dado o estado fundamental representado pelo setor  $(q, ds, p)$  os setores  $(q + 1, ds + 1, p')$ ,  $(q + 1, ds - 1, p')$ ,  $(q - 1, ds + 1, p')$ ,  $(q - 1, ds - 1, p')$  representam os únicos estados finais que têm elementos de matriz com o estado fundamental (lembramos que nosso cálculo é efetuado à temperatura  $T=0$ ). Os símbolos  $C_{NE}$ ,  $C_{NW}$ ,  $C_{SE}$  e  $C_{SW}$  representam os elementos de matriz invariantes. b) Mesma representação da Figura (a) mostrando o procedimento numérico utilizado; calculamos para cada setor as contribuições nas direções  $C_{NE}$  e  $C_{NW}$ , as demais são encontradas comparando (a) e (b) como descrito no texto.

Localizado o setor  $(q, ds, p, r=0)$  (estado fundamental  $|\Omega\rangle$ ) e os setores  $(q + 1, ds \pm 1, p', r')$ ,  $(q - 1, ds \pm 1, p', r')$  (estados finais  $\langle f|$ ) com seus respectivos elementos de matriz invariantes, devemos multiplicar esses elementos por coeficientes de Clebsch-Gordon apropriados a fim de obter os elementos de matriz desejados na Eq.(AII.2).

Após identificar quais densidades espectrais esses elementos representam — se densidade par ou ímpar, se rumo  $NE$ ,  $NW$ ,  $SE$  ou  $SW$  — armazenamos os mesmos em arquivos para serem usados futuramente.

No código computacional, a função  $do\_phase(TOP)$ , após percorrer todos os setores — isto é variar  $q = q_{max} \rightarrow q_{min}$ ,  $ds = 0 \rightarrow ds_{max}$ ,  $p = 0,1$  — encontra o setor

que representa o estado fundamental. Encontrado esse setor, utilizamos a última de nossas classes, ainda não explicada, a *class Outcd*.

*Outcd* : Localizado o estado fundamental, ao final de cada fase, é necessário, como descrito acima: i) identificar os possíveis estados finais que contribuem para a densidade espectral, ii) identificar os elementos de matriz invariantes entre eles, iii) multiplicar esses elementos por coeficientes de Clebsch-Gordon que retornem os elementos de matriz que definem as densidades espectrais, iv) imprimir em arquivos distintos cuidadosamente separados, em função da paridade e da região de energia a que correspondem,  $\varepsilon > 0$  ( $C_{NE}$ ,  $C_{NW}$ ) ou  $\varepsilon < 0$  ( $C_{SE}$ ,  $C_{SW}$ ), os vários elementos de matriz e suas respectivas energias. Como todo esse processo é necessário ao final de cada fase e segue uma mesma estrutura definimos a *class Outcd*. Essa classe armazena um ponteiro para um arquivo que tem um nome relacionado à densidade espectral que será armazenada nele, por exemplo *cd\_even.ne* (densidade espectral par na direção *NE*, direção essa do estado final em relação ao estado fundamental). *Outcd* possui também um método (função embutida) que imprime os dados de que iremos precisar para calcular as densidades espectrais. Neste método são executadas as tarefas (i), (ii), (iii), (iv) citadas acima.

Todo esse o cálculo descrito da densidade espectral é feito a cada fase e, todo processo repete-se até  $N = N_{max}$ .

Concluído o processo iterativo, possuímos as densidades espectrais como função da energia para um parâmetro de discretização  $z$  fixo, conforme Eq.(AII.2). Para obter um espectro contínuo das linhas discretas produzidas pela Eq.(AII.2),

precisamos fazer a média da função  $\rho^z(\varepsilon)$  sobre  $z$  no intervalo  $z_o \leq z \leq z_o + 1$  mostrada na Eq.(AII.1).

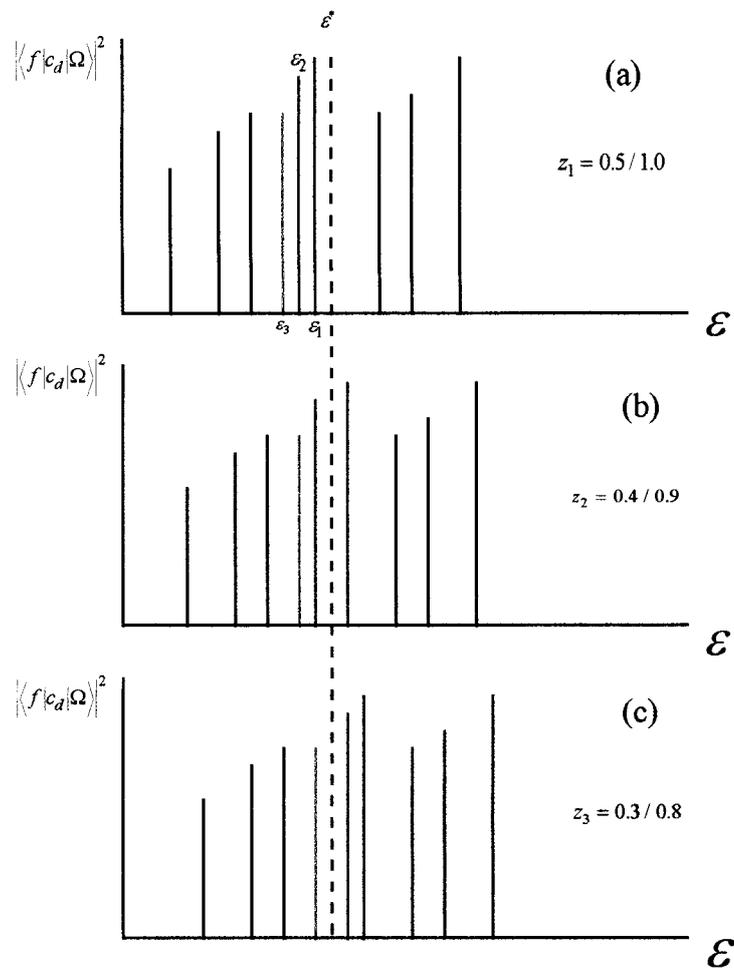
Substituindo a Eq.(AII.2) na Eq.(AII.1), obtemos a seguinte expressão para a densidade ( $\varepsilon < 0$ )

$$\rho_{dp}(\varepsilon) = \sum_f \left. \frac{|\langle f | c_{dp} | \Omega \rangle|^2}{d(E_f^z - E_\Omega^z)} \right|_{E_f^z - E_\Omega^z = \varepsilon} \quad (\text{AII.3})$$

Para  $\varepsilon > 0$  a expressão é semelhante.

Para calcular a Eq.(AII.3) é necessário executar o processo iterativo para a sequência  $z_m = 0.1m$  ( $m = 1, \dots, 10$ ) [22]. Como mostramos no Cap. II, discretizamos a banda de condução usando dois valores distintos de  $z_m$  ( $z_e = 0.5; z_o = 1.0$ , por exemplo) e, daqui para frente designamos por  $z_m$  o conjunto de dois  $z$ 's diferindo de 0.5 ( $z_1 = 0.1/0.6$ ,  $z_2 = 0.2/0.7$ , ...). Para um determinado valor de  $N$ , como descrito no Cap. II, temos uma janela de energia cujo intervalo é  $\Lambda^{-(N-1)2} E_{\text{lim}} \leq \varepsilon \leq \Lambda^{-(N+1)2} E_{\text{lim}}$ . A energia média deste intervalo  $\varepsilon^*$  é nossa energia de interesse. Lembrando que trabalhamos com valores discretos de energia geralmente não obtemos exatamente  $\varepsilon^*$  e sim energias próximas à de interesse. Assim, para cada  $z_m$ , encontramos as energias mais próximas de  $\varepsilon^*$  com seus respectivos pesos espectrais  $|\langle f | c_d^+ | \Omega \rangle|^2$ . Seguimos as linhas espectrais ao variar  $z_m$  e marcamos aquelas que ultrapassam a energia  $\varepsilon^*$ . A Fig.(AII.5) ilustra esse

raciocínio, por exemplo, em (a) a energia  $\varepsilon_1$  está a esquerda de  $\varepsilon^*$ , em (b) está a direita, esta será então o peso espectral que contribuirá no cálculo de  $\rho(\varepsilon^*)$ .



**Figura AII.5** - Representação pictórica das linhas espectrais em função da energia para diferentes valores do parâmetro de discretização  $z_m$ .  $\varepsilon^*$  é a energia de interesse, onde queremos obter o valor da densidade espectral. Devido ao processo de discretização, não possuímos exatamente  $\varepsilon^*$ , apenas energias próximas ( $\varepsilon_1, \varepsilon_2, \varepsilon_3$ ). As linhas, que para dois valores consecutivos de  $z_m$ , ultrapassarem  $\varepsilon^*$  serão as que contribuirão no cálculo de  $\rho(\varepsilon^*)$ .

Para encontrar o valor da densidade espectral em  $\varepsilon^*$  precisamos, primeiramente, calcular a derivada que aparece no denominador da Eq.(AII.3) para

cada uma dessas linhas. Essa derivada é calculada numericamente pela expressão aproximada

$$\left. \frac{d(E_f - E_\Omega)}{dz} \right|_{z_m} = \left. \frac{dE_f^*}{dz} \right|_{z_m} \cong \frac{[E_f^*(z_m + \Delta) - E_f^*(z_m)]}{\Delta} \quad (\text{AII.4})$$

onde escolhemos o incremento  $\Delta = 0.001$ . Finalmente, interpolamos os valores de densidade encontrados em nossas energias discretas para encontrar a densidade na energia  $\varepsilon^*$  desejada. Todo esse processo é feito para cada valor de  $N$  a fim de varrer todo o espectro.

Assim, na prática, para obter as densidades espectrais em todo o espectro de energia, em cada conjunto de dados, necessitamos executar o código numérico iterativo 10 vezes ( $z = 0.1; 0.6 \rightarrow z = 0.2; 0.7 \rightarrow z = 0.3; 0.8 \rightarrow z = 0.4; 0.9 \rightarrow z = 0.5; 1.0 \rightarrow z = 0.101; 0.601 \rightarrow z = 0.201; 0.701 \rightarrow z = 0.301; 0.801 \rightarrow z = 0.401; 0.901 \rightarrow z = 0.501; 1.001$ ) para fase alta par e mais 10 vezes para fase baixa par. Esta inversão entre as fases se faz necessária para computar todos os valores de energia,  $z = 0.1, \dots, 1.0$ , da banda par e todos os valores da banda ímpar.

### AII.3 - Dados de execução

Nessa seção vamos apresentar alguns dados que coletamos durante execuções do código numérico, enfatizando a relação entre a energia de corte  $E_{\text{lim}}$ , o número máximo de iterações  $N_{\text{max}}$ , o tempo de execução, a memória necessária e a precisão

dos resultados. O microcomputador onde executamos esses cálculos é um Pentium 233MHz, 128Mbytes de memória *RAM*, 512 Mbytes de *swap*.

Inicialmente, escolhemos as duas impurezas infinitamente separadas, caso em que o problema de duas impurezas recai no de uma impureza. Na Tab.(AII.2), apresentamos resultados onde consideramos:

a)  $E_{\text{lim}} = 100$ , sendo que a fase alta da terceira iteração é a última a ser executada antes de esgotar a memória disponível no microcomputador.

b)  $E_{\text{lim}} = 20$  e  $N_{\text{max}} = 31$ . O tempo de execução é apresentado na Tab.(AII.2) mas como podemos observar, a diferença percentual entre os resultados numéricos, comparados aos esperados, são bastante imprecisos. A maneira como calculamos e comparamos as densidades é detalhado no Cap. IV.

c) Aumentando  $E_{\text{lim}} = 30$  e  $N_{\text{max}} = 33$ , encontramos resultados confiáveis que concordam, dentro de uma faixa de erro aceitável, com os resultados analíticos. Observe, porém, que o tempo de execução é de aproximadamente 6 dias.

d) Acompanhando a execução do código numérico ( para  $E_{\text{lim}} = 30$ , por exemplo) verificamos que as primeiras iterações são mais lentas, a partir de  $N > 4$  a execução torna-se rápida. Isso se deve aos coeficientes codiagonais da banda de condução  $\bar{t}$  que são maiores para  $N = 2,3,4$ . Para ganhar maior precisão e reduzir o tempo de execução usamos um método que compensa a diferença entre os tempos das iterações iniciais e finais. Nas iterações iniciais usamos uma energia limite baixa  $E_{\text{lim}} = 16$ ; descartamos um maior número de estados. A partir de  $N \approx 4$  aumentamos  $E_{\text{lim}} = 30$ ; mantemos mais estados. Desenvolvendo vários testes verificamos que este é um bom compromisso entre tempo de computação e precisão das densidades

computadas a baixas energias, como podemos observar na linha (d) da Tab.(AII.2). Denotaremos por  $E_{lim} = 16\_30$ , esse tipo de corte, onde duas escalas são introduzidas. O tempo de execução passou para aproximadamente 1 dia e as diferenças entre os resultados mantêm-se na faixa de erro aceitável (máximo 2% nesse tipo de cálculo).

$k_F R = \infty; \Lambda = 10; z_e = 0.5; z_o = 1.0$					desvio da fórmula de Langreth (%)	
	$E_{lim}$	$N_{max}$	Tempo de processamento(h)	Memória (Mbytes)	densidade par	densidade ímpar
a)	100	3 - alta	50:31	esgotada		
b)	20	31	10:26	80	20.28	1.20
c)	30	33	153:58	400	1.19	0.009
d)	16_30	31	26:35	120	1.5	0.2

**Tabela AII.2** - Dados,  $E_{lim}$ ,  $N_{max}$ , tempo de processamento, memória gasta e erro, referentes a execução do código numérico para impurezas infinitamente separadas e acoplamento com a banda de condução  $J = 8V^2/U = 0.1D$ .

A seguir escolhemos  $R = \pi$ , interação RKKY antiferromagnética, para alguns valores de  $J$ . Os mesmos dados da Tab.(AII.2) são mostrados na Tab.(AII.3) para o novo conjunto de parâmetros. No item a)  $J = 0.1D$ ; b)  $J = 0.14D$  e c)  $J = 0.2D$ .

$k_F R = \pi, \Lambda = 10; z_e = 0.5; z_o = 1.0$					desvio da fórmula de Langreth (%)	
	$E_{lim}$	$N_{max}$	Tempo de processamento(h)	Memória (Mbytes)	densidade par	densidade ímpar
a)	18_32	19	20	150	0.1	1.1
b)	18_32	21	20	150	0.6	0.6
c)	18_32	21	20	150	0.7	0.5

**Tabela AII.3** - Dados,  $E_{lim}$ ,  $N_{max}$ , tempo de processamento, memória gasta e erro, referentes a execução do código numérico para impurezas separadas a uma distância  $R = \pi$  (acoplamento RKKY antiferromagnético). a)  $J = 0.1D$ ; b)  $J = 0.14D$  e c)  $J = 0.2D$ .

Para o acoplamento RKKY ferromagnético ( $R = \pi/2$ ), o número máximo de iterações deve ser da ordem de 37 para se aproximar do ponto fixo estável. Executamos com energia limite  $E_{lim} = 16_30$  e os resultados não foram satisfatórios. Resultados satisfatórios foram obtidos com energias, no mínimo,  $20_32$ .

Na Tab. (AII.3) apresentamos o tempo de execução para o cálculo das densidades espectrais do regime antiferromagnético para execução fase alta par e fase baixa par em função da energia limite, do número máximo de iterações e de  $z$ . O tempo de execução ficou em torno de 14 dias e os resultados obtidos são os apresentados no Cap. IV que podem ser melhorados se as energias limites forem aumentadas.

$N_{MAX}$	$z$	fase alta par tempo (h)	fase baixa par tempo (h)	energia limite $E_{lim}$
21	0.1/0.6	4:36	8:55	25_35
21	0.2/0.7	5:47	14:06	25_35
21	0.3/0.8	9:35	15:40	25_35
21	0.4/0.9	12:38	17:11	25_30
21	0.5/1.0	23:00	26:43	25_30
21	0.101/0.601	2:41	5:23	25_35
21	0.201/0.701	3:23	8:32	25_35
21	0.301/0.801	5:15	9:32	25_35
21	0.401/0.901	7:19	10:09	25_30
21	0.501/1.001	13:19	16:20	25_30
11	0.6/1.1	7:30	8:24	20_20
11	0.7/1.2	15:26	14:49	20_20
11	0.8/1.3	19:32	19:12	22_18
11	0.601/1.101	4:25	4:51	20_20
11	0.701/1.201	8:26	8:20	20_20
11	0.701/1.201	11:01	11:13	20_18

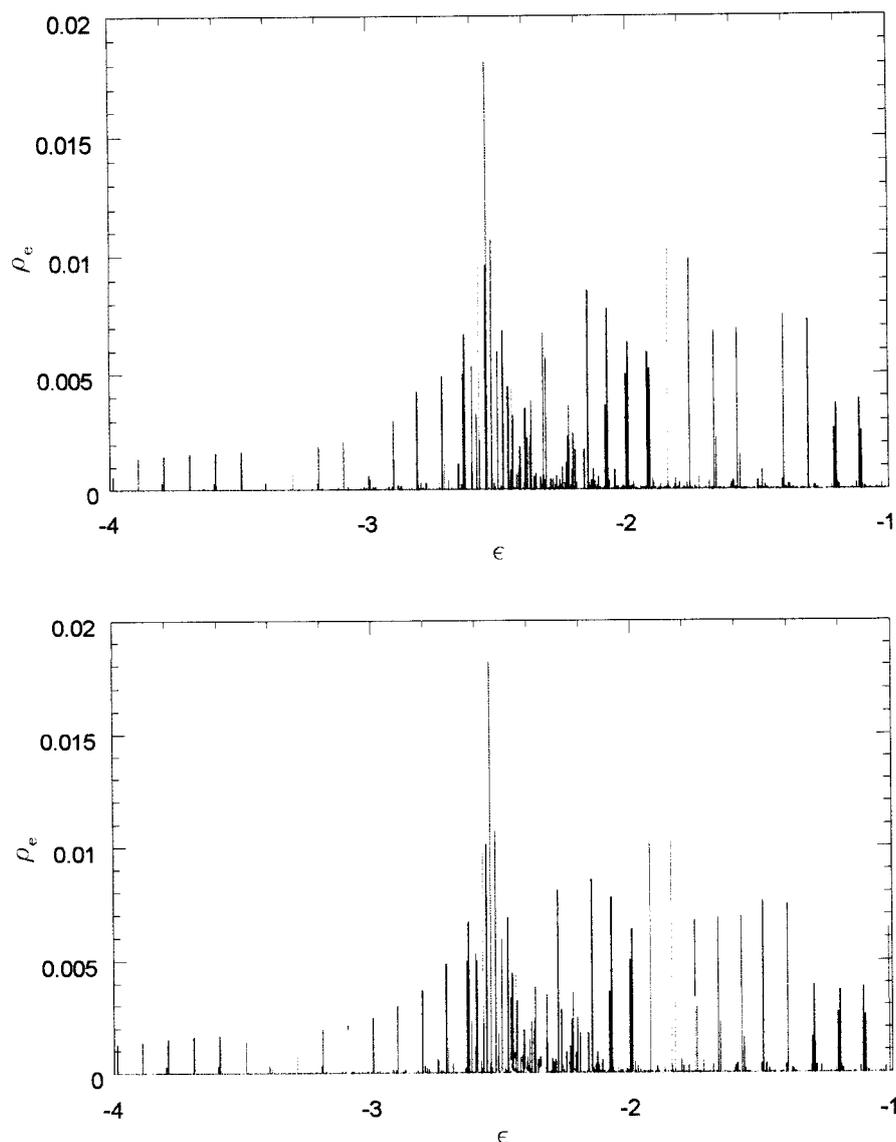
**Tabela AIL4** - Tempo de processamento numérico para cálculo das densidades espectrais do regime antiferromagnético. O tempo total de execução ficou em torno de 14 dias. Para reduzir o tempo de processamento, como neste regime o Hamiltoniano se encontra no ponto fixo estável para  $N = 9$ , nas últimas execuções o número de iterações foi reduzindo para 11.

Esses dados dão uma idéia do esforço computacional para se calcularem as densidades espectrais.

## AII.4 - Algumas Dificuldades Computacionais

A primeira dificuldade encontrada é relacionada a energia limite, como já discutimos anteriormente. Na Fig.(AII.6) mostramos as linhas espectrais antes de efetuar o processo de suavização descrito na seção (AII.2). Cada cor corresponde a um conjunto de  $z$ 's que diferem de 0.5, por exemplo, a cor vermelha corresponde a  $z = 0.3$  e  $z = 0.8$ . É fácil observar algumas falhas nas linhas espectrais decorrentes de linhas importantes que foram descartadas pelo corte.

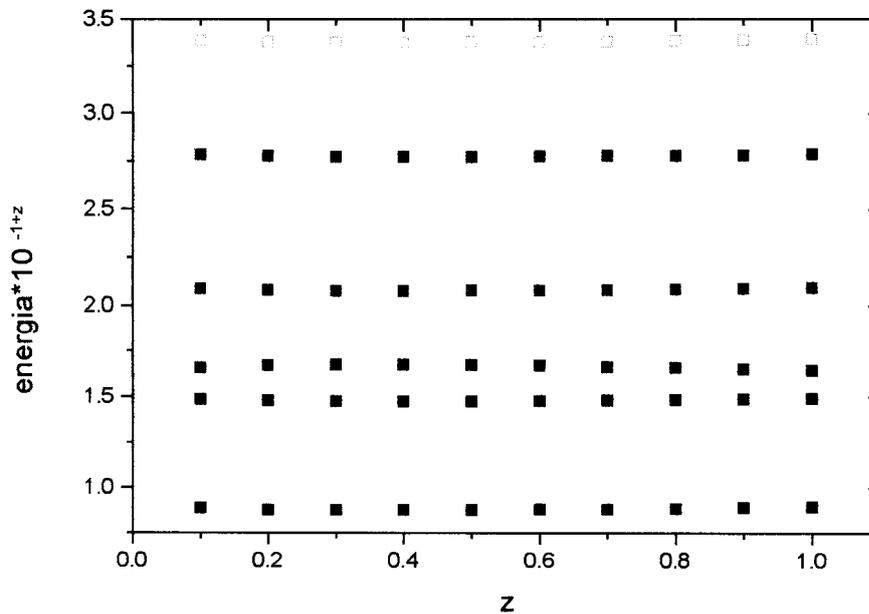
Observamos também, que as linhas espectrais calculadas no intervalo  $0.1 < z < 1.1$  (figura superior) apresentavam resultados espúrios. A figura inferior corresponde ao intervalo  $0.3 < z < 1.3$ .



**Figura AII.6**– Linhas espectrais par ( $\varepsilon < 0$ ) em escala logarítmica de energia para  $k_F R = \pi$ . Na figura superior as linhas espectrais para o intervalo  $0.1 < z < 1.1$  e na inferior para o intervalo  $0.3 < z < 1.3$ . Cada cor representa um conjunto de  $z$ 's diferindo de 0.5

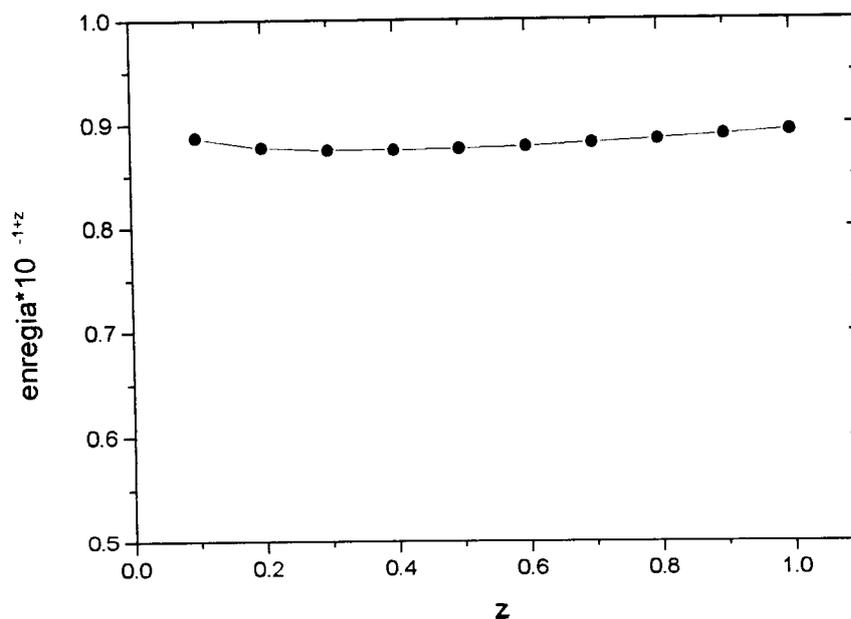
A diferença entre os dois espectros da Fig.(AII.6) são evidentes. No caso (a) aparecem dois picos no intervalo de energia  $10^{-3} < \varepsilon < 10^{-2}$  e falhas nas linhas espectrais em função de  $z$ . No caso (b) aparece apenas um pico  $\varepsilon \cong I$  e as linhas espectrais seguem a mudança com  $z$  sem deixar falhas. Fazendo um gráfico da energia em função de  $z$  esperamos que esta seja constante quando escalada pelo fator

$\Lambda^{-1+z}$ , no limite de  $N$  grande (ponto fixo estável). Na Fig.(AII.7) apresentamos um gráfico mostrando esse comportamento.



**Figura AII.7**– Energia multiplicada por  $\Lambda^{-1+z}$  em função de  $z$ . Apenas os primeiros 6 níveis são mostrados.

Aparentemente esse comportamento é o esperado mas escolhendo-se apenas uma das energias da Fig.(AII.7) observa-se que existe uma pequena dependência com  $z$ , e mais, para  $z = 0.1$  e  $z = 0.2$  o comportamento é diferente dos demais valores de  $z$ . Veja Fig.(AII.8).



**Figura AII.8**– Primeira energia da Fig.(AII.7) em função de  $z$ .

Esse efeito deve-se ao cálculo dos coeficientes diagonais da banda de condução que é instável para esses valores. Optamos então em trabalhar no outro intervalo de  $z$ ,  $0.3 < z < 1.3$ . Embora nesse caso ainda ocorra um pequeno desvio nas energias em função de  $z$  há uma tendência de um comportamento uniforme. Tal mudança acarretou maior gasto de tempo computacional para execução dos novos resultados.

## REFERÊNCIAS

- [1] S. Alexander and P.W. Anderson, Phys. Rev. **133**, A1595 (1964)
- [2] M.A Ruderman; C. Kittel, Phys. Rev. **96**, 99 (1954)
- [3] T. Kasuya, Prog. Of Theor. Phys. **16**, 45 (1956)
- [4] K Yosida, Phys. Rev. **107**, 396 (1954)
- [5] K.G. Wilson, Rev. Mod. Phys. **47**, 773 (1975)
- [6] B.A Jones; C.M.Varma; J.W.Wilkins, Phys. Rev. Lett. **61**,125 (1988)
- [7] B.A. Jones and C.M. Varma, Phys. Rev. Lett., **58**, 843 (1987)
- [8] R.M. Fye; J.E. Hirsch, Phys. Rev. B, **40**, 4780 (1989)
- [9] R.M. Fye, Phys. Rev. Lett., **72**, 916 (1994)
- [10] C.Sire; C.M.Varma; H.R.Krishna-murthy, Phys. Rev. B, **48**, 13833 (1993)
- [11] I.Affleck, A.W.W.Ludwig, Phys. Rev. Lett., **67**, 161, (1991)
- [12] J.Gan, Phys. Rev. B, **51**, 8287 (1995)
- [13] J.B. Silva; W.L.C. Lima; W.C. Oliveira, J.L.N. Mello; L.N. Oliveira; J.W. Wilkins, Phys. Rev. Lett., **76**, 275 (1996)
- [14] D.C. Langreth, Phys. Rev., **150**, 516 (1966)
- [15] P.W. Anderson, Phys. Rev. **124**, 41 (1961)
- [16] J.R. Schrieffer and P.A. Wolff, Phys. Rev., **149**, 415 (1966)
- [17] J. Kondo, Prog. Of Theor. Phys. **32**, 37 (1964)

- [18] P.W. Anderson and G. Yuval, Phys. Rev.Lett., **28**, 89 (1969); Phys. Rev.B, **1**, 1522 (1970)
- [19] H.R. Krishna-murthy.; J.W. Wilkins; K.G. Wilson, Phys. Rev. B **21**, 1003 (1980)
- [20] H.O Frota; L.N. Oliveira, Phys. Rev. B, **33**, 7871 (1986)
- [21] L.N. Oliveira, V.L. Líbero, H.O. Frota and M. Yoshida; Physica B, **171**, 61 (1991)
- [22] M. Yoshida; M.A. Whitaker; L.N.Oliveira, Phys.Rev.B, **41**, 9403 (1990)
- [23] S.C. Costa, C.A. Paula, V.L. Líbero, L.N. Oliveira; Phys. Rev. B, **55**, 30 (1997)
- [24] A.M Tselvick; P.B.Wiegmann, Adv. Phys., **32**, 453 (1983)
- [25] L.N. Oliveira; Brazilian Journal of Physics, **22**, 155 (1992).
- [26] N.Andrei, K.Furuya and J.Lowenstein; Rev. Mod. Phys., **55**, 331 (1983).
- [27] W.L.C. Lima *Assimetria Particula-buraco no modelo Kondo de duas impurezas. Tese de Doutorado (IFSC-1997)*
- [28] O. Sakai, Y. Shimizu and T. Kasuya; Solid State Communications, **75**, 81 (1990).
- [29] O. Sakai, Y. Shimizu and T. Kasuya, J. Phys. Soc. Jpn., **58**, 3666 (1989).
- [30] H.O. Frota, Phys. Rev. B, **45**, 1096 (1992)
- [31] J. Hirsh; R Fye, Phys. Rev. B, **56**, 2521 (1986)
- [32] N.E.Bickers, Rev. Mod. Phys., **59**, 845 (1987)
- [33] W.C. Oliveira and L.N.Oliveira, Phys.Rev.B, **49**, 11986 (1994)
- [34] R. Haydock, *Solid State Physics*, edited by H. Ehrenreich, F. Seitz, and D. Turnbull (Academic, New York, 1980), **35**, p.215
- [35] J.B. Silva *Novo Método de Grupo de Renormalização Numérico Aplicado ao Cálculo da Suscetibilidade Magnética no Modelo de Anderson de Duas Impurezas. Tese de Doutorado (IFQSC-1994)*

- [36] A.L. Fetter e J.D. Walecka, *Quantum Theory of Many-Particle Systems*, New York, Mc Graw-Hill, Apêndice B.
- [37] B.A. Jones *Numerical Renormalization Group Approach to the Two-Impurity Kondo Hamiltonian* Cornell University (1988)
- [38] Bjarne Stroustrup, *The C++ Programming Language*, Second Edition, Addison-Wesley Publishing Company, 1994.
- [39] Richard s. Wiener, Lewis J. Pieneon., *Programação Orientada para Objeto e C++*, Editora Mc Graw-Hill I tda, São Paulo, 1991
- [40] M.Salomaa, *Z. Phys. B*, **25**, 49 (1976)
- [41] A.Yoshimori and A.Zawadowski, *J.Phys.C:Solid State Phys.*, **15**, 5241(1982)
- [42] G.D. Mahan, *Many-Particle Physics*, Plenum Press, Second Edition, New York, 1990.
- [43] H.O. Frota *Fotoemissao no Modelo de Anderson para Compostos de Terras-Raras com Valência Flutuante*. Tese de Doutorado (IFQSC-1986)
- [44] G.D. Mahan, *Phys. Rev.*, **163**, 612(1967)
- [45] P.W. Anderson, *Phys. Rev. Lett.*, **18**, 1049(1967)
- [46] P. Nozières and C.T. De Dominicis, *Phys. Rev.*, **178**, 1097(1969)
- [47] S.Doniach and M.Sunjic, *J.Phys.C:Solid State Phys.*, **3**, 285(1970)
- [48] L.N. Oliveira *Renormalization Group Approach to the X-Ray Absorption Problem and Application to the Viegman-Finkelshtein Model for Magnetic Impurities in Metals* Cornell University (1981)