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

Modelo de Anderson de dois canais

João Vítor Batista Ferreira

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

ORIENTADOR: *Prof. Dr. Valter L. Líbero*

SÃO CARLOS

2000

Resumo

Nozières e Blandin generalizaram o Modelo Kondo através da inclusão de mais graus de liberdade. Eles investigaram um sistema formado de uma impureza magnética em um metal hospedeiro, considerando a estrutura orbital da impureza, campo cristalino e interações spin-órbita. Este sistema é representado pelo Hamiltoniano de Kondo Multicanal: a interação entre a impureza local e a banda de condução é feita via canais (cada canal representa um conjunto de números quânticos bem definidos). Nozières e Blandin mostraram o aparecimento de um ponto fixo anômalo no regime de acoplamento finito.

Esse ponto fixo anômalo pode explicar o comportamento não-líquido de Fermi de compostos de terras-raras e actinídeos. Cox e colaboradores usaram o Hamiltoniano Kondo Quadrupolar para representar sistemas de férmions pesados em urânio e óxidos supercondutores de alta temperatura, os quais podem ser mapeados em um Modelo Kondo de dois canais.

Como o Modelo Kondo tradicional (um canal) é o limite de baixa temperatura do Modelo Anderson, é interessante também generalizar este último para incluir mais canais.

Nesta tese nós mostramos que o mesmo procedimento trivial, o qual generaliza o Hamiltoniano Kondo, não funciona para o Modelo de Anderson. Nós usamos um Hamiltoniano proposto por Cox para representar o Modelo de Anderson de dois canais. Usando a transformação de Schrieffer-Wolff nós demonstramos que este Hamiltoniano é equivalente ao Hamiltoniano Kondo de dois canais em baixas temperaturas. E finalmente, nós aplicamos o Grupo de Renormalização Numérico para investigar os níveis de mais baixa energia, a suscetibilidade magnética e o calor específico.

Abstract

Nozières and Blandin generalized the Kondo Model by including more degrees of freedom. They investigated a system made of magnetic impurity in a metal host, considering impurity orbital structure, crystalline field and spin-orbit interactions. This system is represented by multichannel Kondo Hamiltonian: the interaction between local impurity and conduction band is done via channels (each channel represents a set of well defined quantum numbers). They showed that anomalous fixed point appears at finite coupling.

The anomalous fixed point can explain the non-Fermi Liquid behaviour of rare earths and actinides compounds. Cox et al used a quadrupolar Kondo Hamiltonian for uranium heavy-fermion materials and high-temperature superconducting oxides, which can be mapped to a two-channel Kondo Model.

Since Kondo Model is a low temperature limit of Anderson Model, would be interesting to generalize this last one including many channels.

In this thesis we show that the same trivial procedure, which generalizes the Kondo Hamiltonian, does not work with the Anderson Model. We use a model Hamiltonian proposed by Cox to represent the two-channel Anderson Model. Using the Schrieffer-Wolf transformation we prove this Hamiltonian is equivalent to the two-channel Kondo Hamiltonian. And finally, we have applied Numerical Renormalization Group calculations to investigate the lowest energy levels, susceptibility and specific heat.

Agradecimentos

- Ao Prof. Valter pela paciência.
- Aos colegas de grupo Vivaldo, Luís Ramos, Nilva, Marcelo, Neemias, Kerson, Antônio, Klaus, Sandra, Cíntia e prof. Luís Nunes.
- Aos amigos Henrique, Nazareno, Ana Tereza, Paulo Roberto, Viviane, Paulo Alexandre, Roberto, Reginaldo, Queite, Carlos Alberto, ...
- Aos funcionários do IFSC: Wladerez, Bruno, Luciano, Nilzeli, Cristina, Mateus, ...
- À minha namorada Sueli e à minha família pelo apoio e incentivo: minha mãe Nanuh, minhas irmãs Patrícia e Joanice.
- Especialmente aos amigos e conhecidos que esqueci de citar...
- À Deus, criador das duas maçãs: a da consciência (Eva) e a do conhecimento (Newton).

Este trabalho foi financiado pela Capes.

Sumário

1	Apresentação	16
1.1	Introdução	16
1.2	Modelo de Anderson de dois canais	21
1.3	Grupo de Renormalização Numérico (GRN)	23
1.4	Resultado: comportamento não-líquido de Fermi	24
1.5	Organização da tese	27
2	Modelos de Anderson	28
2.1	Modelo de Anderson de um canal	29
2.2	Modelo de Anderson de dois canais	35
2.2.1	Proposta de Cox	36
2.2.2	Transformação de Schrieffer-Wolff para dois canais	39
3	Diagonalização do Hamiltoniano de Anderson de dois canais pelo GRN	44
3.1	Grupo de Renormalização Numérico: histórico	44
3.2	Hamiltoniano de Anderson de dois canais	45
3.3	Discretização logarítmica	46
3.3.1	Primeira etapa da discretização	48
3.3.2	Segunda etapa da discretização	50
3.4	Simetrias	53
3.5	Diagonalização iterativa	55
3.5.1	Os vetores da base	56

3.5.2	Os elementos de matriz de H_N	59
3.5.3	Invariantes	61
3.5.4	Iteração $N = -1$	62
3.5.5	Iteração $N = 0$	64
3.6	Equivalência com o Modelo de Kondo de dois canais	66
3.7	GRN e pontos fixos	68
3.8	Cálculo da suscetibilidade magnética e do calor específico	70
3.9	Implementação computacional	72
4	Resultados	77
4.1	Pontos fixos do Hamiltoniano de Anderson de dois canais	77
4.1.1	Regime de impureza livre: $V_1 = V_2 = 0$ e Δ qualquer	80
4.1.2	Regime anisotrópico: $V_1 \neq V_2$	83
4.1.3	Regime isotrópico: $V_1 = V_2$	85
4.2	Suscetibilidade magnética	87
4.2.1	Regime anisotrópico: $V_1 \neq V_2$	88
4.2.2	Regime isotrópico: $V_1 = V_2$	90
4.3	Calor específico	93
4.4	Sugestões para trabalhos futuros	96
A	Construção dos vetores da base	98
B	Construção dos elementos de matriz	102
C	Construção dos Invariantes	109
	Referências Bibliográficas	116

Lista de Figuras

- 1.1 Dados experimentais da suscetibilidade do $Th_{1-x}U_xRu_2Si_2$, retirado da Ref. [8]. Estes dados mostram divergência logarítmica em baixa temperatura. 17
- 1.2 Efeito Kondo multicanal. S é o spin da impureza, s é o spin dos elétrons de condução e S' é o spin resultante. Nozières e Blandin analisaram uma impureza magnética considerando sua estrutura orbital, campo cristalino e desdobramento spin-órbita. Isso resulta no acoplamento da impureza com a banda de condução através de *canais* (cada canal representa um conjunto de números quânticos). Quando os acoplamentos de cada canal com a impureza forem iguais e o número de canais n for diferente de $2S$, o spin da impureza não é devidamente compensado. No item *a*) temos a situação em que $n < 2S$ resultando num spin total S' diferente de zero paralelo ao spin da impureza. No item *b*) $n > 2S$, resultando em um spin total S' diferente de zero antiparalelo ao spin da impureza. 19
- 1.3 Diagrama do modelo de Anderson de dois canais. Trata-se de uma impureza magnética em um metal hospedeiro não magnético. O metal é representado pela sua banda de condução, que é semi-preenchida, isotrópica e de largura $2D$. A impureza é representada pelo seu estado fundamental e por dois dos seus estados excitados. O estado fundamental é um dubleto que tem m elétrons, spin total $\sigma = \pm 1/2$ e energia E_o . Os estados excitados são dois dubletos que têm $m \pm 1$ elétrons, spin total nulo, energia E_{ex} e canal $\alpha = 1$ ou 2. O termo de hibridização entre a banda de condução e a impureza é V_α . 22

1.4	Temperatura vezes suscetibilidade magnética da impureza em função de T/T_K para o Modelo de dois canais. V_α é o termo de hibridização entre a impureza e os elétrons de condução do canal α ($\alpha = 1, 2$), D é a meia largura da banda de condução do metal e $\Delta = E_{ex} - E_0$, sendo E_0 o nível de energia do estado fundamental da impureza e E_{ex} a energia do estado excitado. A linha cheia é a curva universal obtida por Tsvelick et al para o Efeito Kondo de um canal.	26
2.1	Esquema do Modelo de Anderson tradicional. A banda de condução do metal é semi-preenchida e isotrópica. A impureza é representada pelas suas quatro configurações possíveis, sendo ε_d a energia do orbital quando ocupado com apenas um elétron e $2\varepsilon_d + U$ quando ocupado por dois elétrons. V é a energia de hibridização. Se $2\varepsilon_d + U = 0$ temos o chamado Modelo de Anderson simétrico, que exibe simetria partícula-buraco.	29
2.2	No Modelo de Kondo o spin da impureza é fixo, podendo apenas mudar sua orientação quando espalha os elétrons de condução.	31
2.3	Temperatura multiplicada pela suscetibilidade magnética em função de $k_B T/D$ do Modelo de Anderson de um canal. A linha cheia é a curva universal do Modelo de Kondo de um canal. No inset podemos perceber o comportamento linear em baixas temperaturas.	33
2.4	Representação hipotética da energia de valência de uma impureza com orbital semi-preenchido para as configurações de energia mais baixas. A parábola é dada pela expressão $E_m = E_d m + U m(m-1)/2$, onde E_d é a energia do orbital (em relação ao nível de Fermi), e m é o número de elétrons no orbital. Veja que fazendo $m = 0$, $m = 1$, ou $m = 2$ reproduzimos os níveis de energia da impureza do Modelo de Anderson (Fig. 2.1).	37

2.5	Modelo de Anderson de dois canais em que o estado fundamental é um dubleto com m partículas e spin total $\sigma = \pm 1/2$ e dois dubletos como estados excitados, com $m \pm 1$ partículas, spin total igual a zero e com canal α .	38
2.6	Esquema de interações entre os estados da impureza e os elétrons de condução. m é o número de elétrons no orbital da impureza. $\sigma = \pm 1/2$, quando $\alpha = 1$, $-\alpha = 2$ e vice-versa. Em a) um elétron de condução (k, σ, α) se hibridiza com o estado local $(m - 1, -\alpha)$ e forma o estado de spin σ . Em b) um elétron de condução $(k, -\sigma, \alpha)$ se hibridiza com o estado local (m, σ) em uma combinação singlete, resultando em estado de canal $(m + 1, \alpha)$ (spin 0). Logicamente processos inversos são permitidos.	39
2.7	No esquema superior temos o Modelo de Anderson tradicional (um canal) na configuração de caso simétrico. Logo abaixo, temos o mesmo modelo mas agora com notação $ m, \sigma\rangle$ onde m é o número de elétrons e σ é o spin total do estado. No esquema inferior temos o Modelo de Anderson de dois canais em que o estado fundamental é um dubleto com m partículas e spin total σ e dois dubletos como estados excitados, com $m \pm 1$ partículas, spin total igual a zero e com canal α .	40
3.1	a) Banda de condução com largura $2D$, semi-preenchida e isotrópica. b) A banda é discretizada logaritmicamente pelos parâmetros $\Lambda > 1$, sendo Λ um número inteiro, e $z > 0$ onde z é um número real. O primeiro intervalo é $1 < \varepsilon_k < \Lambda^{-z}$ e os demais são obtidos pela divisão por Λ (para o lado negativo da banda o procedimento é análogo). c) Multiplicando por Λ^n , n inteiro positivo, a estrutura de níveis de mais baixa energia (próximos ao nível de Fermi) não muda.	47

3.2 Do trabalho de Krishnna-murthy retiramos estas três figuras que representam as bases dos operadores da banda de condução. a) Base de operadores $c_{\varepsilon,\sigma,\alpha}$, onde os estados têm energia bem definida mas são delocalizados espacialmente. A impureza está localizada em $r = 0$. b) Base de operadores $\{a_{n,\sigma,\alpha}^\dagger, b_{n,\sigma,\alpha}^\dagger\}$ onde as energias dos estados estão restritas aos valores médios de cada intervalo. Veja que quanto maior é a energia associada aos operadores a e b , mais em torno da impureza eles são (as caixas de tamanhos diferentes mas rasuradas da mesma forma representam o mesmo par de operadores). c) Base de operadores $\{f_{n,\sigma,\alpha}^\dagger\}$ onde os estados somente se acoplam com estados vizinhos de acordo com a transformação de Lanczos. f_0 é o estado mais localizado espacialmente em torno da impureza, mas é o menos localizado no espaço das energias. O oposto ocorre para n grande. 51

3.3 Pontos fixos e trajetórias no espaço de fase. Em a) temos um ponto fixo estável. Em b) temos um ponto fixo que é estável em uma direção (linha reta), mas instável nas outras o que significa que ele tem pelo menos um operador relevante. 70

3.4 Esquema do procedimento intercalado mostrando, como exemplo, uma banda discretizada com $\Lambda = 4$ e $z = 1.0$ (em cima), outra com $\Lambda = 4$ e $z = 0.5$ (no meio) e outra com $\Lambda = 2$ e $z = 1.0$ (em baixo). Podemos ver que intercalando a banda de cima com a banda do meio teremos a banda com $\Lambda = 2$ e $z = 1.0$ 71

3.5 Duas curvas de calor específico com os mesmos parâmetros $V_1 = 0.005$, $V_2 = 0.01$ e $\Delta = E_{ex} - E_0 = 0.002$, mas em um deles foi feito o procedimento intercalado. Podemos observar que as oscilações são sensivelmente reduzidas com este processo. 72

3.6 Algoritmo do processo iterativo do GRN. No final da iteração $N - 1$, H_{N-1} já está completamente diagonalizado, portanto são conhecidos seus auto-estados e seus autovalores. Cada auto-estado vai gerar vários estados de base na iteração seguinte (N), com novos números quânticos de acordo com os procedimentos delineados na Tabela 3.2. Estes novos vetores são agrupados de acordo com os números quânticos formando sub-espacos. Encontrados os elementos de matriz, os sub-espacos são diagonalizados resultando nos autovalores e autovetores de H_N 73

4.1 Diagrama do modelo de Anderson de dois canais. O estado fundamental tem m elétrons, spin total σ diferente de zero e energia E_o . Os estados excitados têm $m \pm 1$ elétrons, spin total nulo e energia E_{ex} . Esses estados são hibridizados com a banda de condução através do termo proporcional a V_α em H_N . A diferença de energia $E_{ex} - E_o$ denominamos de Δ 79

4.2 Dois pares de gráficos de banda livre $V_1 = V_2 = 0$. Em (a) temos $\Delta = 0$ enquanto que em (b) $\Delta = 0.2$. Como a energia mantém-se constante em grande parte das iterações dizemos que o sistema está num regime de ponto fixo, no caso, de banda livre. A estrutura dos níveis de energia igualmente espaçados caracteriza comportamento de líquido de Fermi. Observe a natureza dos estados fundamentais para N par ou ímpar através dos seus números quânticos. 81

4.3	Preenchimento dos níveis de energia do sistema impureza e banda de condução livres (desacoplados). A banda é separada em canais 1 e 2. Cada canal tem banda par e banda ímpar. Existe uma defasagem intrínseca entre a banda par e ímpar devido à discretização logarítmica, sendo que a banda par tem um nível com energia zero (o que significa que ela pode estar vazia, com um ou com dois elétrons). Como não há nenhum tipo de acoplamento entre os canais e a impureza, as bandas par e ímpar de cada canal mantêm essa defasagem intrínseca.	82
4.4	Os gráficos têm parâmetros do regime anisotrópico $V_1 \neq V_2 \neq 0$. Podemos observar que esse ponto fixo independe dos valores de V_α e os níveis de mais baixa energia são igualmente espaçados. O estado fundamental para N ímpar é degenerado mostrando que um dos canais ficou livre (aquele com $ 0, 0, 1/2\rangle$) e o outro canal blindou a impureza perfazendo efeito Kondo e resultando em spin total zero ($ 0, 1/2, 0\rangle$ para $V_1 < V_2$ ou $ 1/2, 0, 0\rangle$ para $V_1 > V_2$). Análise semelhante pode ser feita para N par. Como explicado no texto, não há distinção entre os níveis de energia para N par ou ímpar no ponto fixo.	83
4.5	Preenchimento dos níveis de energia do sistema impureza e banda de condução para o regime anisotrópico $V_1 \neq V_2$. Esse diagrama representa o caso particular em que $V_1 < V_2$, o que significa que no ponto fixo o canal 1 está livre e o canal 2 está totalmente acoplado com a impureza, blindando-a (efeito Kondo). Podemos observar que a banda par e ímpar do canal 1 não se modificam (banda livre), enquanto que no canal 2 os níveis de energia da banda par e da banda ímpar se inverteram, efeito já conhecido na técnica do GRN.	84

4.6	Ponto fixo isotrópico, com $V_1 = V_2 \neq 0$. Podemos observar que esse ponto fixo independe dos valores de V_1 e V_2 . Os níveis de energia não são resultados da combinação de N par e N ímpar do ponto fixo de banda livre, nem são igualmente espaçados. O estado fundamental tem spin total 1/2, refletindo a super compensação dos elétrons de condução dos dois canais. .	86
4.7	Diagramas de pontos fixos. a) Diagrama do Modelo de Anderson de um canal: OL é o ponto fixo de orbital livre, ML é o ponto fixo de momento local e FA é o ponto fixo fortemente acoplado. b) Diagrama de pontos fixos do Modelo de Anderson de dois canais. Além dos pontos fixos anteriores, que aparecem no regime anisotrópico, aparece um novo ponto fixo no regime isotrópico. Como veremos, esse novo ponto fixo têm comportamento de sistema não-líquido de Fermi.	87
4.8	Regime anisotrópico - temperatura vezes suscetibilidade em função de $k_B T/D$, para vários parâmetros do modelo, todos em unidade da meia-largura da banda D . Para $\Delta > 0$ o sistema desenvolve momento local e $T\chi$ se aproxima de 1/4 (a,b,c). Para $\Delta < 0$, não há formação de momento local e $T\chi$ vai a zero rapidamente (d).	88
4.9	Regime anisotrópico - temperatura vezes suscetibilidade em função da temperatura T escalada pela temperatura Kondo T_K . A curva cheia representa o comportamento universal de $T\chi$ do Modelo de Kondo de um canal. Quando $T = T_K$ temos que $T_K\chi(T_K) = 0.0705$. Usamos esse critério para descobrir a temperatura Kondo de cada curva acima.	89
4.10	Regime isotrópico - suscetibilidade magnética versus temperatura. Para $\Delta > 0$ (curvas b,c,d,e) há formação de momento local, enquanto para $\Delta < 0$ não (curva a).	91

- 4.11 Regime isotrópico - suscetibilidade magnética vezes temperatura em função de T/T_K para vários escalados pela temperatura de Kondo T_K . A linha cheia é a curva universal de Kondo para um canal. A curva contínua indicada pela seta mostra o comportamento $-T \ln T$ em baixas temperaturas. 92
- 4.12 No gráfico de cima temos a contribuição da impureza ao calor específico em função de $k_B T/D$ para o regime anisotrópico e para o regime isotrópico. Como é esperado, em altas temperaturas as curvas coincidem. Já em baixas temperaturas a curva azul (anisotrópica) tem comportamento de líquido de Fermi, enquanto a outra mostra comportamento não-líquido de Fermi, como pode ser observado no inset. A linha contínua sobre pico à esquerda na curva anisotrópica é a curva universal de Kondo de uma canal com $T_k = 1.2 \cdot 10^{-6} D$. No gráfico de baixo temos os graus de liberdade da impureza obtidos através da exponencial da entropia. A temperatura T_K para a curva isotrópica é $1.8 \cdot 10^{-7} D$ 94

Lista de Tabelas

3.1	Vetores formados pelas combinações dos estados de cada canal. Vetores com mesmos números quânticos estão no mesmo grupo, diferenciados pelo índice r . Devido à definição de carga axial 3.16 e 3.17, um par de elétrons em um canal na iteração N é acompanhado pelo sinal $(-1)^N$	57
3.2	Tipo e combinação. Nesta Tabela j'_1, j'_2 e s' são números quânticos dos auto-estados da iteração $N - 1$	57
3.3	Estados que combinam entre si. Por exemplo, o estado formado pelo tipo 8 só se combina com os estados formados pelos tipos 2,3,5 e 6.	60
3.4	4 combinações possíveis para os invariantes.	61
3.5	Auto-estados da iteração $N = -1$ e correspondentes vetores da base de $N = 0$ (filhos), criados a partir dele segundo a Tabela 3.2. Usamos a notação $ j_1, j_2, s, r\rangle_{tipo}$, onde r é o índice de contagem dos vetores que têm o mesmo número quântico e <i>tipo</i> indica qual o procedimento que resultou neste vetor.	64
3.6	Na iteração $N - 1$ temos um sub-espço com tamanho 4×4 , três com tamanho 3×3 , dois com tamanho 2×2 e cinco sub-espços com tamanho 1×1	64
3.7	Níveis de energia de H_0 até ordem V^2/Δ onde $F = \sqrt{V_1^4 + V_2^4 - 2V_1^2V_2^2}$	67
3.8	Oito conjuntos de parâmetros para realização do procedimento intercalado para obtenção de calor específico no caso isotrópico.	76

B.1	Dois vetores da base da iteração N : aqui $ 4\rangle_N$ significa vetor gerado pelo procedimento <i>tipo</i> 4 enquanto $ 12\rangle_N$ significa vetor gerado pelo procedimento <i>tipo</i> 12 (ver Tabela 3.2).	103
-----	--	-----

Capítulo 1

Apresentação

Esta tese tem por principal objetivo a diagonalização de um Hamiltoniano que representa o Modelo de Anderson para dois canais, utilizando o Grupo de Renormalização Numérico. Este capítulo apresenta a motivação para este trabalho, resume o procedimento desenvolvido e apresenta brevemente o principal resultado.

1.1 Introdução

A teoria do comportamento de líquido de Fermi para sistemas em baixas temperaturas, desenvolvida principalmente por Landau, pode ser considerada como um dos grandes pilares em matéria condensada. Sua premissa básica é que elétrons de condução interagentes, mas com energias suficientemente próximos do nível de Fermi, podem formar um conjunto de quase-partículas que se comportam como livres. Por isso as propriedades advindas desse gás de elétrons podem ser mapeadas naquelas de elétrons livres, com algumas grandezas renormalizadas, como por exemplo a massa dos elétrons. Essa teoria prevê comportamento linear para o calor específico e valor constante para a suscetibilidade magnética (como funções da temperatura), em energias abaixo de uma escala característica para cada composto. Inúmeros sistemas físicos seguem essas leis simples, particularmente nos regimes de alta diluição de impurezas magnéticas em metais não magnéticos.

Figura 1.1: Dados experimentais da suscetibilidade de $Th_{1-x}U_xRu_2Si_2$, retirado da Ref. [8]. Estes dados mostram divergência logarítmica em baixa temperatura.

Indubitavelmente, o Modelo de Kondo tradicional [1] está entre os mais relevantes na obtenção de propriedades do tipo das de um líquido de Fermi. Esse modelo considera um gás de elétrons de condução, com spin $\vec{s}$, sendo espalhados por uma impureza magnética localizada, com spin $\vec{S}$, segundo o termo de troca $J\vec{s} \cdot \vec{S}$. No regime de temperaturas baixas, próximo a um valor característico conhecido como temperatura Kondo, os elétrons de condução do metal hospedeiro blindam o spin da impureza, anulando o seu caráter magnético (fenômeno conhecido como Efeito Kondo).

A teoria de Landau e o Modelo de Kondo tiveram sucesso em descrever vários fenômenos, mas alguns materiais, por exemplo compostos de terras-raras ou actínideos, apresentam propriedades físicas que muito diferem daquelas previstas pela teoria do líquido de Fermi [2]. Particularmente, medidas de calor específico e suscetibilidade magnética em temperaturas muito baixas mostram comportamentos não-líquido de Fermi em tais sistemas [3], como por exemplo mostrado na Fig. 1.1. A precisão dessas medidas permite propor novos modelos e comparar com outros já existentes [4]. Sistemas formados por esses

compostos apresentam uma física muito rica, que tem atraído atenção dos pesquisadores.

Seria por demais extenso, embora bastante interessante, descrever aqui os diversos modelos que contribuem para a nossa compreensão dos sistemas não-líquido de Fermi. Em todos, no entanto, há a idéia básica de uma ou mais impurezas acopladas aos elétrons de condução e resultando em Efeito Kondo isolado ou coletivo. Destacamos apenas alguns estudos representativos. Na Ref. [5], usando um tratamento de campo médio via funções de Green, o efeito de desordem em redes de Anderson (ex., $\text{UCu}_{5-x}\text{Pd}_x$) leva a uma distribuição espacial de temperaturas Kondo sobre a amostra, induzindo comportamento não-líquido de Fermi. Uma solução exata no caso particular de dimensão infinita para a rede de Anderson, com a simplificação adicional de correlação eletrônica nula, é mostrada na Ref. [6]. Nessa abordagem o problema é reduzido efetivamente ao caso de um sítio e é tratado por campo médio dinâmico e encontra-se um regime metálico para a resistividade com propriedades não-líquido de Fermi. Particularmente interessante é o trabalho da Ref. [7] em que as propriedades anômalas de uma rede em uma dimensão e em temperatura nula são estudadas via teoria de scaling de fenômenos críticos.

O nosso trabalho não foge à regra e utiliza também uma generalização do Modelo de Kondo acima mencionado. Está na categoria dos modelos de impurezas localizadas e não-interagentes, oposto aos modelos de rede de impurezas. Esse limite de impurezas isoladas tem sido tratado com muita frequência e detalhe na literatura (uma excelente revisão é a Ref. [8]), onde procura-se tratá-lo de forma mais realista levando em conta efeitos do campo cristalino nos níveis dos multipletos de mais baixa energia (originários do efeito spin-órbita). O modelo que utilizamos tem sua origem na análise realizada por Nozières e Blandin [9] em que uma impureza complexa ao interagir com o gás de elétrons de condução os divide em dois grupos, ou canais como ficaram denominados. Eles observaram, dentre outras coisas, que existiria a possibilidade da ocorrência de um Efeito Kondo super-compensado, em que a impureza se acoplaria com os elétrons da banda de condução do metal e o resultado não seria um spin total nulo, mas sim, diferente de zero. Ilustramos isso na Fig. 1.2.

um metal via dois canais através do GRN. Esse estudo deveria permitir não só que se calculassem algumas propriedades termodinâmicas como também a densidade espectral da impureza. Para essa última, o Hamiltoniano de Kondo de dois canais não é mais adequado, visto que nele a valência da impureza é fixa.

O Modelo de Kondo de um canal é o caso limite de valência inteira do Modelo de Anderson tradicional (um canal), que é bem sucedido na compreensão de sistemas fortemente correlacionados, apesar de ser bastante simplista se comparado à complexidade de materiais reais. O Hamiltoniano de Anderson tradicional foi diagonalizado numericamente pelo GRN [15] e algebricamente por ansatz de Bethe [16]. Sua generalização para o caso de dois canais, no entanto, não é trivial, como foi no caso Kondo. O objetivo deste trabalho é mostrar uma possível generalização, que permite obter propriedades não triviais em baixa temperatura e, obviamente, ter o modelo tradicional como caso particular.

Em nosso trabalho de tese nós:

i) Analisamos a generalização do Hamiltoniano de Anderson para o caso de dois canais.
 ii) Utilizando a Transformação de Schrieffer-Wolff demonstramos que o Hamiltoniano por nós utilizado (Hamiltoniano de Anderson de dois canais proposto por D. L. Cox) tem o Hamiltoniano de Kondo de dois canais como limite em baixa temperatura.

iii) Escolhendo simetrias convenientes do modelo, diagonalizamos numericamente o Hamiltoniano de dois canais usando o GRN. Ao contrário de outros métodos em que os cálculos de propriedades termodinâmicas se restringem ao limite de baixas energias ou aproximações incontroláveis, o GRN permite o cálculo de altas até baixas temperaturas, e é um método não-perturbativo. Verificamos que os recentes avanços na técnica do GRN, para eliminação de oscilações espúrias originárias do cálculo numérico, são também eficazes em sistemas sem características de líquido de Fermi.

iv) Analisamos o comportamento do Modelo de Anderson de dois canais para dois casos: quando os acoplamentos (V_1 e V_2) da impureza com os elétrons de condução através de canais são diferentes entre si (caso anisotrópico: $V_1 \neq V_2$) e quando estes acoplamentos são iguais (caso isotrópico: $V_1 = V_2$). Mostramos que o estudo dos níveis de energia dos

primeiros estados excitados já permite identificar o comportamento não-líquido de Fermi do modelo para o caso isotrópico.

v) Calculamos, pela primeira vez usando o GRN, a suscetibilidade magnética multiplicada pela temperatura e o calor específico deste modelo, desde altas até baixas temperaturas e para diferentes valores de acoplamentos (V_1 e V_2). Mostramos que no caso anisotrópico $V_1 \neq V_2$ o Modelo de Anderson de dois canais apresenta comportamento semelhante a um modelo de um canal (líquido de Fermi) e no caso isotrópico $V_1 = V_2$ apresenta comportamento não-líquido de Fermi.

Na próxima seção vamos apresentar o Modelo de Anderson de dois canais.

1.2 Modelo de Anderson de dois canais

Nesta tese nós utilizamos o Hamiltoniano proposto por D. L. Cox [17], que denominamos de Hamiltoniano de Anderson de dois canais ou Hamiltoniano de dois canais. Este Hamiltoniano é uma generalização do Hamiltoniano tradicional, onde ao invés do acoplamento entre a banda de condução do metal e a impureza ocorrer através de apenas um canal, o acoplamento pode ocorrer através de dois canais distintos. O sistema a ser representando pelo Hamiltoniano de Anderson de dois canais é uma impureza magnética dentro de um metal não magnético e está esquematizado na Fig. 1.3.

O metal é representado pela sua banda de condução. Esta é isotrópica, semi-preenchida e tem uma largura total de $2D$ ($2D \sim 10eV$). A impureza é representada pelo seu estado fundamental e por dois dos seus estados excitados. O estado fundamental $|m, \sigma\rangle$ é um dubleto que tem m elétrons, spin total $\sigma = \pm 1/2$ e energia E_0 . Os estados excitados $|m+1, \alpha\rangle$ e $|m-1, \alpha\rangle$ são dois dubletos que têm $m \pm 1$ elétrons, spin total nulo, energia E_{ex} e canal $\alpha = 1$ ou 2 . O termo de hibridização entre a banda de condução e a impureza é V_α .

O Modelo de Anderson de dois canais aqui considerado é definido pelo seguinte Hamil-

Modelo de Anderson de dois canais

Figura 1.3: Diagrama do modelo de Anderson de dois canais. Trata-se de uma impureza magnética em um metal hospedeiro não magnético. O metal é representado pela sua banda de condução, que é semi-preenchida, isotrópica e de largura $2D$. A impureza é representada pelo seu estado fundamental e por dois dos seus estados excitados. O estado fundamental é um dubleto que tem m elétrons, spin total $\sigma = \pm 1/2$ e energia E_0 . Os estados excitados são dois dubletos que têm $m \pm 1$ elétrons, spin total nulo, energia E_{ex} e canal $\alpha = 1$ ou 2 . O termo de hibridização entre a banda de condução e a impureza é V_α .

toniano:

$$\begin{aligned}
 H = & \sum_{\vec{k}, \sigma, \alpha} \epsilon_k c_{\vec{k}, \sigma, \alpha}^\dagger c_{\vec{k}, \sigma, \alpha} + E_{ex} \sum_{\alpha} (|m-1, \alpha\rangle \langle m-1, \alpha| + |m+1, \alpha\rangle \langle m+1, \alpha|) + \\
 & + E_0 \sum_{\sigma} |m, \sigma\rangle \langle m, \sigma| + \sum_{\vec{k}, \sigma, \alpha} V_\alpha (f_{-1, \sigma, \alpha}^\dagger c_{\vec{k}, \sigma, \alpha} + h.c.),
 \end{aligned}$$

onde $c_{\vec{k}, \sigma, \alpha}^\dagger$ cria um elétron na banda de condução com energia ϵ_k e spin $\sigma = \pm 1/2$ e canal α . O operador $f_{-1, \sigma, \alpha}^\dagger$ hibridiza o estado fundamental com os estados excitados da impureza e é definido da seguinte forma

$$f_{-1, \sigma, \alpha}^\dagger = |m, \sigma\rangle \langle m-1, -\alpha| + (2\sigma) |m+1, \alpha\rangle \langle m, -\sigma|.$$

Por exemplo, o termo $|m, \sigma\rangle \langle m-1, -\alpha| c_{\vec{k}, \sigma, \alpha}$ representa o processo em que a impureza passa do estado $|m-1, -\alpha\rangle$ para o estado $|m, \sigma\rangle$ ao receber um elétron da banda de condução com momentum $\vec{k}$, spin σ e canal α . No Cap. 2 vamos explicar o Modelo de Anderson de dois canais com detalhes.

Quando $V_1 \neq V_2$ dizemos que o sistema está no regime anisotrópico e quando $V_1 = V_2$ dizemos que o sistema está no regime isotrópico. Como mostraremos nesta tese, enquanto o regime anisotrópico corresponde ao comportamento do Modelo de Anderson tradicional, em que o spin da impureza é completamente blindado pelos elétrons de condução, o comportamento isotrópico resulta em um Efeito Kondo super-compensado resultando em um spin líquido e em um comportamento não-líquido de Fermi.

O modelo então proposto mistura spin e dois canais de condução. Ele tem uma potencial aplicação em compostos tais como $U_x\text{Th}_{1-x}\text{Ru}_2\text{Si}_2$ no regime de baixa concentração, em que propriedades de impurezas isoladas são esperadas [18].

1.3 Grupo de Renormalização Numérico (GRN)

Diagonalizamos o Hamiltoniano de Anderson de dois canais utilizando o Grupo de Renormalização Numérico (GRN). Esta técnica foi utilizada por K. G. Wilson para solucionar o problema Kondo [15]. Usando o mesmo procedimento, Krishna-murthy, Wilson e Wilkins investigaram o Hamiltoniano de Anderson tradicional (um canal) [19]. Importante avanço no GRN foi proposto no trabalho de Yoshida, Oliveira e colaboradores, que consiste no uso de um parâmetro adicional de discretização da banda de condução [20], técnica que usamos nesta tese. Este novo parâmetro mostrou-se útil para o cálculo de propriedades termodinâmicas como calor específico e suscetibilidade magnética [21, 22].

Em linhas gerais, o GRN estabelece uma transformação no Hamiltoniano tal que as escalas de energia são acrescentadas ordenadamente ao problema. Assim, constrói-se um método iterativo em que o Hamiltoniano H é diagonalizado numericamente a cada iteração. O número de iterações (N) é arbitrário e está relacionado com a temperatura que desejamos alcançar. A técnica do GRN permite alcançar temperaturas tão baixas quanto se queira.

Para facilitar a diagonalização, utilizaram-se as simetrias existentes no modelo. Como mostraremos nesta tese, cada canal tem um operador com simetria $SU(2)$, denominado

carga axial (J_α), que é conservado. Além disso, o spin total da impureza também é conservado (S). Assim, utilizamos esses números quânticos para designar um estado durante o processo iterativo ($|j_1, j_2, s\rangle$). Mesmo utilizando essas simetrias, o grande número de graus de liberdade do problema torna-o bastante complicado, o que exigiu que desenvolvêssemos um procedimento complexo para a implementação da técnica do GRN.

No GRN a diagonalização das matrizes é feita numericamente. Construímos o código computacional utilizando o método de Programação Orientada a Objeto (POO) e a linguagem C++. Nesse método de programação, a ênfase é a construção de objetos: conjuntos constituídos por dados relacionados e suas operações. No código computacional que desenvolvemos, um dos objetos principais é aquele definido pela classe *Indices*, pois guarda os valores importantes para a manipulação de cada subespaço do Hamiltoniano e de seus elementos. Estes valores são o tamanho do sub-espaço, autovalores, autovetores, etc. A classe *Indices* não contém nenhuma referência aos números quânticos j_1 , j_2 e s , sendo esta uma característica que a torna fácil de ser reutilizada. O resultado é que o código computacional é reutilizável com poucas adaptações em novos problemas. Outras características da POO é a facilidade da depuração do código e a alocação e liberação dinâmica, que permite aproveitamento eficiente de memória.

Com a diagonalização dos subespaços temos os autovalores do Hamiltoniano, que já permitem a análise dos regimes anisotrópico ($V_1 \neq V_2$) e isotrópico ($V_1 = V_2$) e a identificação do comportamento de líquido de Fermi e de não-líquido de Fermi respectivamente. Com os autovalores também obtemos a suscetibilidade magnética e o calor específico em função da temperatura.

1.4 Resultado: comportamento não-líquido de Fermi

Nesta seção vamos mostrar sucintamente o resultado principal desta tese. Com a diagonalização do Hamiltoniano podemos então verificar o comportamento dos seus autovalores à medida que as escalas de energia vão sendo acrescentadas ao modelo por meio do pro-

cesso iterativo do GRN. Os parâmetros de entrada que caracterizam o sistema são: os acoplamentos entre a impureza e os canais (V_1 e V_2), o nível de energia E_0 do estado da impureza não ionizada $|m, \sigma\rangle$ e o nível de energia E_{ex} para os estados da impureza ionizada $|m + 1, \alpha\rangle$ e $|m - 1, \alpha\rangle$. Podemos analisar diferentes regimes simplesmente arbitrando valores convenientes para esses parâmetros.

Conforme já antecipamos e que mostraremos com mais detalhes nesta tese, o regime anisotrópico, $V_1 \neq V_2$, apresenta comportamento equivalente ao Modelo de Anderson tradicional (um canal), onde o caráter magnético da impureza é anulado em baixa temperatura [23].

Restringir-nos-emos nesta seção a relatar o regime isotrópico, $V_1 = V_2$, no qual a blindagem pelos elétrons de condução, vindos de dois canais, excede o spin da impureza ($n > 2S$), resultando em um spin líquido diferente de zero. Isso é responsável pelo comportamento anômalo, ou de não-líquido de Fermi, por exemplo, da suscetibilidade magnética ou do calor específico. Na Fig. 1.4 apresentamos $T\chi$ em função de T/T_K , onde T_K é a temperatura Kondo, para duas curvas no regime isotrópico. Podemos perceber que elas apresentam comportamentos similares entre si, mas bem diferentes do comportamento universal característico do Efeito Kondo tradicional (um canal). Em baixas temperaturas $T\chi$ comporta-se proporcional a $-T \ln(T/T_K)$, resultado já previsto na literatura [24, 25, 8] e verificado através da expressão de ajuste mostrada na Fig. 1.4. Isso contrasta com o comportamento linear característico dos líquidos de Fermi.

Esses resultados foram apresentados no International Conference on Magnetism 2000 (ICM2000) e constarão no ICM200 Proceedings, que será publicado no Journal of Magnetism and Magnetic Materials, em 2001 [26, 27].

Análise semelhante realizamos para o calor específico, como está mostrado no Cap. 4. Cabe ressaltar que o cálculo do calor específico exige um esforço computacional considerável, e só obtivemos algum sucesso com o uso da linguagem C++, pela sua maior facilidade em manusear grandes quantidades de memória de processamento. Mesmo assim, esforços adicionais serão necessários para se conseguir melhores curvas de calor específico.

Figura 1.4: Temperatura vezes suscetibilidade magnética da impureza em função de T/T_K para o Modelo de dois canais. V_α é o termo de hibridização entre a impureza e os elétrons de condução do canal α ($\alpha = 1, 2$), D é a meia largura da banda de condução do metal e $\Delta = E_{ex} - E_0$, sendo E_0 o nível de energia do estado fundamental da impureza e E_{ex} a energia do estado excitado. A linha cheia é a curva universal obtida por Tsvelick et al para o Efeito Kondo de um canal.

Na próxima seção apresentaremos a organização desta tese.

1.5 Organização da tese

Finalizando este capítulo, apresentaremos a estrutura da tese.

No Capítulo 2 apresentamos o Hamiltoniano de Anderson de dois canais: motivação, comparação com o Hamiltoniano de Anderson tradicional e demonstração da equivalência com o Hamiltoniano de Kondo de dois canais através da transformação de Schrieffer-Wolff.

No Capítulo 3 apresentamos a diagonalização do Hamiltoniano pelo GRN: discretização logarítmica da banda de condução, construção da base conveniente, método iterativo, pontos fixos, desenvolvimento do código computacional, métodos para eliminação das oscilações espúrias, etc.

No Capítulo 4 apresentamos os resultados: fluxos dos níveis de energia dos autovalores do Hamiltoniano, suscetibilidade magnética e calor específico. No final do capítulo apresentamos sugestões para trabalhos futuros.

Capítulo 2

Modelos de Anderson

O Modelo de Anderson tradicional é bastante conhecido na literatura e descreve uma impureza magnética localizada em um metal não-magnético. O Modelo de Anderson tem o Modelo de Kondo como um caso particular, onde a impureza apresenta uma valência fixa inteira e um momento magnético diferente de zero. Nestes dois casos a impureza é tratada apenas como um orbital S representado por um nível de energia. Nozières e Blandin [9] analisaram a impureza localizada de maneira mais realista, como por exemplo, considerando seus graus de liberdade orbital e o efeito do campo cristalino da rede. Apesar da aparente complexidade dessa abordagem, eles mostraram que o efeito final é a separação da banda de condução em dois grupos de elétrons, denominados genericamente de canais. O modelo com dois canais, certamente a generalização mais simples, já é suficiente para exibir comportamento não-líquido de Fermi.

Neste capítulo vamos trabalhar exatamente nessa direção, mostrando a dificuldade na generalização do Modelo de Anderson usual para um modelo de dois canais. Apresentaremos um Hamiltoniano de Anderson generalizado e sua correspondência com o Modelo de Kondo de dois canais, através da transformação de Schrieffer-Wolff [28]. Primeiramente, no entanto, será bastante oportuno mostrarmos o Modelo de Anderson de um canal, que não só motiva o trabalho com dois canais, mas servirá para definir várias grandezas fundamentais.

Figura 2.1: Esquema do Modelo de Anderson tradicional. A banda de condução do metal é semi-preenchida e isotrópica. A impureza é representada pelas suas quatro configurações possíveis, sendo ε_d a energia do orbital quando ocupado com apenas um elétron e $2\varepsilon_d + U$ quando ocupado por dois elétrons. V é a energia de hibridização. Se $2\varepsilon_d + U = 0$ temos o chamado Modelo de Anderson simétrico, que exibe simetria partícula-buraco.

2.1 Modelo de Anderson de um canal

O Modelo de Anderson tradicional foi concebido para representar ligas magnéticas diluídas [29]. Considera-se uma liga magnética diluída aquela onde metais magnéticos estão dissolvidos em metais não-magnéticos com uma concentração menor que um por cento, sendo por isso considerados como impurezas. Estas impurezas criam momentos magnéticos localizados quando têm camadas de valência interna (orbitais d ou f) incompletas. Na Figura 2.1 representamos o Modelo de Anderson, onde o metal não magnético é simbolizado por uma banda de condução de largura $2D$ semi-preenchida e isotrópica. Os elétrons desta banda têm energia ε_k e momento $\vec{k}$. A impureza é representada pelo seu orbital d ou f , com energia ε_d e pode ganhar ou perder elétrons para a banda de condução, ficando em uma das quatro configurações: vazia, com um elétron com spin para cima ou para baixo, ou duplamente ocupada (dois elétrons com spins contrários). No caso da dupla ocupação existe a repulsão Coulombiana U entre elétrons com spin opostos. A banda está acoplada com a impureza através de um elemento de matriz não-diagonal V e, usando a Regra de Ouro de Fermi, a taxa de transição entre a banda de condução e a impureza é dada por $\Gamma = \pi \rho(\varepsilon_F) V^2$, onde $\rho(\varepsilon_F)$ é a densidade de estados de condução por spin no nível de Fermi. O estado fundamental depende do valor da energia ε_d . Se for negativa,

a configuração em que o orbital é ocupado por apenas um elétron é favorecida, já que a colocação de um segundo elétron com spin oposto acrescenta a repulsão Coulombiana U .

Em linguagem de segunda quantização, o Hamiltoniano pode ser escrito assim

$$H = \sum_{k,\sigma} \varepsilon_k c_{k,\sigma}^\dagger c_{k,\sigma} + \varepsilon_d \sum_{\sigma} c_{d,\sigma}^\dagger c_{d,\sigma} + U c_{d,\uparrow}^\dagger c_{d,\uparrow} c_{d,\downarrow}^\dagger c_{d,\downarrow} + \sum_{k,\sigma} V \left(c_{k,\sigma}^\dagger c_{d,\sigma} + c_{d,\sigma}^\dagger c_{k,\sigma} \right), \quad (2.1)$$

onde $c_{k,\sigma}^\dagger$ cria um elétron na banda de condução com energia ε_k e com spin $\sigma = \pm 1/2$, e $c_{d,\sigma}^\dagger$ cria um elétron no orbital da impureza com spin $\sigma = \pm 1/2$.

No caso em que o orbital da impureza tem dois elétrons com spins opostos, o nível de energia é $2\varepsilon_d + U$. Se esse valor for zero, o Hamiltoniano apresenta simetria partícula-buraco (não muda sob a transformação $c_{k,\sigma} \rightarrow c_{-k,\sigma}^\dagger$ e $c_{d,\sigma} \rightarrow -c_{d,\sigma}^\dagger$). Nesse caso recebe o nome de Modelo de Anderson simétrico, e foi inicialmente explorado por K. G. Wilson no desenvolvimento da técnica do Grupo de Renormalização Numérico (GRN). Apesar dessa particularidade, o modelo ainda apresenta as características mais relevantes, como por exemplo, o limite Kondo em baixas temperaturas. O caso generalizado para dois canais que trataremos mais à frente corresponde ao caso simétrico, sendo assim nos restringiremos a mostrar apenas resultados do Modelo de Anderson tradicional simétrico.

Quando $\varepsilon_d < 0$ e a repulsão Coulombiana U é muito maior que a taxa de transição Γ , a configuração com apenas um elétron é favorecida. Schrieffer e Wolff [28] demonstraram que esta situação limite é equivalente ao Modelo de Kondo com interação de troca J igual a

$$\rho J = -\frac{8\Gamma}{\pi U} \quad (2.2)$$

onde $\Gamma = \rho V^2$. A interação de troca J é, no Modelo de Kondo, o termo que permite que os elétrons de condução sejam espalhados pelo spin localizado $\vec{S}$. Enquanto no Modelo de Anderson existe troca de elétrons entre a impureza e a banda de condução, no Modelo de Kondo a impureza tem um número fixo de elétrons, com spin resultante igual a $1/2$. Por isso afirma-se que o Modelo de Kondo é o limite de valência inteira do Modelo de Anderson. Na Fig. 2.2 apresentamos o Modelo de Kondo, no qual o spin da impureza é

Figura 2.2: No Modelo de Kondo o spin da impureza é fixo, podendo apenas mudar sua orientação quando espalha os elétrons de condução.

fixo, podendo apenas mudar a sua orientação. Observe a semelhança entre as Fig. 2.2 e 2.1 quando no Modelo de Anderson os níveis vazio e duplamente ocupado da impureza tiverem energia muito maior que ε_d . O Hamiltoniano de Kondo de um canal é dado pela expressão

$$H = \sum_{\vec{k}, \sigma} \varepsilon_k c_{k, \sigma}^\dagger c_{k, \sigma} - \frac{1}{2} \sum_{\vec{k}, \vec{k}', \sigma, \nu} J c_{\vec{k}, \sigma}^\dagger \vec{\sigma}_{\sigma, \nu} c_{\vec{k}', \nu} \cdot \vec{S}, \quad (2.3)$$

onde σ, ν são os índices de spin. $c_{0, \sigma, \alpha}^\dagger$ cria elétrons no sítio da impureza e $\vec{\sigma}$ é um vetor cujas componentes são as matrizes da Pauli. $\vec{S} = 1/2$ é o spin da impureza e ε_k é a energia dos elétrons de condução medida a partir do nível de Fermi.

O Hamiltoniano de Kondo descreve um fenômeno observado desde a década de 1930, bastante conhecido na literatura atualmente (por exemplo ver Ref. [30]) e que, por isso, relataremos aqui apenas de maneira sucinta. O Efeito Kondo é um fenômeno que se observa em várias substâncias, principalmente ligas metálicas, a baixas temperaturas (em torno de $10K$). À medida que a temperatura diminui, a resistividade decresce monotonicamente até que, em determinada temperatura diferente de zero, observa-se um mínimo na resistividade elétrica. Verificou-se experimentalmente que esse mínimo está relacionado com a presença de impurezas magnéticas no metal hospedeiro. Em geral as impurezas que mostram esse comportamento são elementos de transição $3d$ ou terras-raras $4f$ da tabela periódica. Outra constatação experimental é que o Efeito Kondo é uma propriedade da interação dos elétrons da banda de condução com as impurezas isoladas, isto

é, não é resultante de interação impureza-impureza. Em 1964 Kondo obteve sucesso na explicação desse fenômeno ao propor que esse efeito era resultado da interação entre um spin localizado (proveniente, por exemplo de uma impureza) com os spins dos elétrons de condução do metal hospedeiro. Utilizando-se de um modelo bastante simplista, o modelo $s - d$ isotrópico (que já existia e mais tarde ficou conhecido como Modelo de Kondo [1]), ele fez um cálculo perturbativo e deduziu a existência de um mínimo na resistividade. Apesar desse sucesso, a resolução perturbativa de Kondo suscitou o aparecimento de uma divergência logarítmica na resistividade em uma dada temperatura, que ficou conhecida como temperatura de Kondo T_K :

$$k_B T_K \sim D e^{-\frac{1}{2|\rho J|}} \quad (2.4)$$

A causa dessa divergência é o método perturbativo que se mostra-se ineficiente para resolver o Hamiltoniano de Kondo para temperaturas muito baixas. Em 1975 o Hamiltoniano de Kondo foi diagonalizado sem aproximações pelo GRN [15]. Em seguida, também usando o GRN, diagonalizou-se o Modelo de Anderson [19], que apresenta a vantagem de permitir o cálculo da densidade espectral uma vez que não possui valência fixa.

Como exemplo, mostraremos a seguir a suscetibilidade magnética e calor específico do Modelo de Anderson, obtidos através do GRN. Como essa técnica será detalhada no Cap. 3 aqui não mostraremos nenhum detalhe técnico do GRN. A suscetibilidade magnética χ é definida pela relação

$$\frac{k_B T \chi}{(g \mu_B)^2} = \langle S_z^2 \rangle - \langle S_z \rangle^2, \quad (2.5)$$

onde S_z é a componente z do spin total. A média termodinâmica é calculada usando os autovalores do Hamiltoniano de Anderson obtidos através do GRN [31, 22].

A Fig. 2.3 mostra a *contribuição da impureza* à suscetibilidade, que é obtida subtraindo-se o valor de $T\chi$ da banda livre daquele calculado pela Eq. 2.5, em função da temperatura T . Podemos destacar três regiões importantes nessa figura. Em altas temperaturas, $k_B T \gg \varepsilon_d + U$, as quatro configurações da impureza estão praticamente degeneradas e

Figura 2.3: Temperatura multiplicada pela suscetibilidade magnética em função de $k_B T/D$ do Modelo de Anderson de um canal. A linha cheia é a curva universal do Modelo de Kondo de um canal. No inset podemos perceber o comportamento linear em baixas temperaturas.

o acoplamento V com a banda pode ser desconsiderado. Com isso, temos duas configurações não-magnéticas (a vazia e a duplamente ocupada) e duas magnéticas (uma com spin $+1/2$ e outra com spin $-1/2$) e portanto a média de S_z^2 vale $(0 + 2(1/2)^2 + 0)/4 = 1/8$, sendo o denominador 4 o valor da função de partição nesse limite de alta temperatura. O valor assintótico $1/8$ pode ser visto claramente na Fig. 2.3; esse limite corresponde ao que é denominado de ponto fixo de impureza (banda) livre. À medida que a temperatura abaixa, a separação entre os níveis não-magnéticos e os magnéticos passa a ser percebida e a média de S_z^2 agora tende para o valor $2(1/2)^2/2 = 1/4$ (agora a função de partição vale 2, pois temos apenas as duas configurações magnéticas). A curva de $T\chi$ tende a esse valor para $k_B T/D$ próximo a 10^{-3} como se pode ver na Fig. 2.3. Esse regime recebe o nome de ponto fixo de momento local. O acoplamento V com a banda de condução não deixa $T\chi$ se aproximar do valor $1/4$ e o aparecimento da ressonância Kondo acaba por blindar o momento magnético da impureza através da formação de uma nuvem eletrônica em volta do spin localizado, dessa forma levando $T\chi$ a zero. Esse regime, que acontece para temperaturas menores que a temperatura Kondo T_K , é denominado de fortemente acoplado, ou por vezes simplesmente regime Kondo.

No inset da Fig. 2.3 é visto que a suscetibilidade é constante em baixas temperaturas ($T \ll T_k$), o que caracteriza comportamento líquido de Fermi. Do gráfico estimamos $\chi(T=0) = 1.32 \cdot 10^5$. Da Eq. 5.36 da Ref. [19], relacionamos $\chi(0)$ com a temperatura de Kondo por

$$\frac{\chi(0)}{(g\mu_B)^2} = \frac{0.103}{k_B T_K}. \quad (2.6)$$

Assim, nossa estimativa é $k_B T_k = 7.8 \cdot 10^{-7} D$ para a curva da Fig. 2.3.

A temperatura de Kondo é a única escala de energia relevante no modelo em baixas temperaturas. Assim, espera-se que todas as grandezas mostrem comportamento universal quando expressas em função de T/T_K , para $T \ll T_K$. A curva de $T\chi$ na Fig. 2.3 pode ser justaposta, em baixas temperaturas, pela curva cheia que representa a curva universal de Kondo para $T\chi$, calculada analiticamente por Bethe ansatz [16] ou numericamente por Wilson usando o GRN [15]. Para isso utilizamos $k_B T_K = 7.7 \cdot 10^{-7} D$, em boa concordância com o fornecido pelo valor de $\chi(0)$ acima.

Enquanto a curva universal de Kondo de $T\chi$ sai do valor $1/4$ à medida que a temperatura diminui, refletindo a lei de Curie para um spin $1/2$ livre, a curva do Modelo de Anderson sai do limite $1/8$. Isso acontece porque enquanto o Modelo de Kondo tem apenas duas configurações, o Modelo de Anderson em temperaturas muito altas ($k_B T \approx D$) tem as suas quatro configurações (vazia, duplamente ocupada e duas singelamente ocupadas) igualmente acessíveis. Mas, à medida que a temperatura abaixa e fica da ordem de $k_B T \approx \varepsilon_d + U$, apenas as duas configurações magnéticas (configurações singelamente ocupadas) continuam acessíveis, e por isso a curva do Modelo de Anderson se aproxima da curva do Modelo de Kondo. Assim o Modelo de Anderson e o Modelo de Kondo passam a descrever efetivamente a mesma impureza (com spin $1/2$) e a curva de Anderson tende a se aproximar da curva universal de Kondo.

Tendo discutido os aspectos físicos relevantes do Modelo de Anderson tradicional passaremos a discutir sua generalização incluindo canais de condução.

2.2 Modelo de Anderson de dois canais

Como descrito no Cap. 1, na busca de uma representação mais realista do sistema de impurezas em um metal, Nozières e Blandin consideraram o efeito da estrutura interna da impureza, campo cristalino, etc [9]. O resultado prático disto foi a compreensão de que todos estes fatores fazem com que os elétrons e a impureza interajam através de mais de um conjunto de números quânticos, cada conjunto denominado de um canal.

O conceito de canal permite a generalização trivial do Hamiltoniano de Kondo: basta acrescentar um índice a cada operador da banda de condução: $c_{\vec{k},\sigma} \rightarrow c_{\vec{k},\sigma,\alpha}$, onde $\alpha = 1$ ou 2 no caso de termos dois canais. Sendo assim, o Hamiltoniano que define o Modelo de Kondo de dois canais é

$$H = \sum_{\vec{k},\sigma,\alpha} \epsilon_k c_{\vec{k},\sigma,\alpha}^\dagger c_{\vec{k},\sigma,\alpha} - \frac{1}{2} \sum_{\vec{k},\vec{k}',\sigma,\nu,\alpha} J_\alpha c_{\vec{k},\sigma,\alpha}^\dagger \vec{\sigma}_{\sigma,\nu} c_{\vec{k}',\nu,\alpha} \cdot \vec{S}. \quad (2.7)$$

Utilizando o mesmo procedimento que levou da Eq. 2.3 à Eq. 2.7, do Hamiltoniano de Anderson tradicional obtemos a expressão para o modelo de dois canais:

$$\begin{aligned} H = & \sum_{\vec{k},\sigma,\alpha} \epsilon_k c_{\vec{k},\sigma,\alpha}^\dagger c_{\vec{k},\sigma,\alpha} + \varepsilon_d \sum_{\sigma} c_{d,\sigma}^\dagger c_{d,\sigma} + \\ & + U c_{d,\uparrow}^\dagger c_{d,\uparrow} c_{d,\downarrow}^\dagger c_{d,\downarrow} + \sum_{\vec{k},\vec{k}',\sigma,\alpha} V_\alpha \left(c_{\vec{k},\sigma,\alpha}^\dagger c_{d,\sigma} + c_{d,\sigma}^\dagger c_{\vec{k}',\sigma,\alpha} \right). \end{aligned} \quad (2.8)$$

Assim como no modelo tradicional ε_d é a energia do elétron na impureza e U é a correlação eletrônica. Mas agora tem-se V_α que é o parâmetro de hibridização entre a impureza e os elétrons de condução do canal α .

É fácil mostrar que o modelo definido pelo Hamiltoniano acima na verdade continua descrevendo a interação de uma impureza magnética com elétrons do metal via *apenas um canal*: apenas o parâmetro de acoplamento é modificado. Podemos verificar isto fazendo

a mudança de base:

$$\begin{pmatrix} g_{\vec{k},\sigma,+} \\ g_{\vec{k},\sigma,-} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \theta & \vartheta \\ \vartheta & -\theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{\vec{k},\sigma,1} \\ c_{\vec{k},\sigma,2} \end{pmatrix}, \text{ com } \theta = \frac{V_1}{\sqrt{V_1^2 + V_2^2}}, \vartheta = \frac{V_2}{\sqrt{V_1^2 + V_2^2}}, \quad (2.9)$$

onde $g_{\vec{k},\sigma,\beta}$ são os operadores de destruição de elétrons dos novos canais $\beta = +, -$. A Eq. 2.8 fica, então,

$$\begin{aligned} H = \sum_{\vec{k},\sigma,\alpha} \epsilon_k \left(g_{\vec{k},\sigma,+}^\dagger g_{\vec{k},\sigma,+} + g_{\vec{k},\sigma,-}^\dagger g_{\vec{k},\sigma,-} \right) + E_{dc} c_{d,\sigma}^\dagger c_{d,\sigma} + \\ + U c_{d,\uparrow}^\dagger c_{d,\uparrow} c_{d,\downarrow}^\dagger c_{d,\downarrow} + \sqrt{V_1^2 + V_2^2} \sum_{\vec{k},\sigma} \left(g_{\vec{k},\sigma,+}^\dagger c_{d,\sigma} + h.c. \right), \end{aligned} \quad (2.10)$$

que é o Hamiltoniano de Anderson *tradicional* com o termo de hibridização dado por $\sqrt{V_1^2 + V_2^2}$, junto com uma banda de condução completamente desacoplada ($\beta = -$). Portanto, a Eq. 2.8 não representa o Modelo de Anderson generalizado, e assim, devemos procurar por um procedimento alternativo que resulte num modelo não-trivial.

2.2.1 Proposta de Cox

As impurezas em nosso modelo são átomos com camadas d ou f semi-preenchidas, onde deve-se levar em consideração a degenerescência orbital destes estados de acordo com as regras de Hund, interações spin-órbita e efeitos do ambiente local (campo cristalino). Um procedimento para levar estas interações em consideração é começar com as configurações de mais baixas energias do íon isolado, e então considerar como elas são modificadas quando misturadas com os elétrons de condução do hospedeiro. Na Fig. 2.4 representamos uma impureza hipotética onde seus três estados de mais baixa energia correspondem ao orbital de valência semi-preenchido, um orbital com um elétron a mais e outro com um elétron a menos.

O modelo iônico [32] considera a hibridização entre os elétrons do orbital da impureza e os elétrons de condução e pode ser considerado essencialmente como uma generalização

Figura 2.4: Representação hipotética da energia de valência de uma impureza com orbital semi-preenchido para as configurações de energia mais baixas. A parábola é dada pela expressão $E_m = E_d m + U m(m-1)/2$, onde E_d é a energia do orbital (em relação ao nível de Fermi), e m é o número de elétrons no orbital. Veja que fazendo $m = 0$, $m = 1$, ou $m = 2$ reproduzimos os níveis de energia da impureza do Modelo de Anderson (Fig. 2.1).

do Modelo de Anderson. Infelizmente, este modelo é difícil de ser diagonalizado devido ao grande número de parâmetros envolvidos para representar as mais diversas interações [30].

Como mostrado por Nozières e Blandin, usando argumentos de simetria e universalidade é possível agrupar estas interações em conjuntos de números quânticos bem definidos, canais, reduzindo sensivelmente os números de graus de liberdade do sistema. Esse procedimento foi seguido por vários pesquisadores [23, 18, 33, 34]. Em comunicação particular [17], D. L. Cox propôs um Hamiltoniano de Anderson generalizado para dois canais, onde o estado fundamental da impureza é representado por $|m, \sigma\rangle$ com energia E_0 , m elétrons e spin total $\sigma = \pm 1/2$. A impureza tem ainda dois estados excitados $|m \pm 1, \alpha\rangle$ de energia E_{ex} , com $m \pm 1$ elétrons, spin total zero e canal $\alpha = 1$ ou 2 . Todos esses níveis estão hibridizados com os elétrons de condução do metal através dos canais $\alpha = 1$ ou 2 . Sem a hibridização com a banda, isto é, desacoplando banda e impureza, é fácil de se definir esse novo Hamiltoniano:

$$\begin{aligned}
 H_0 = & \sum_{\vec{k}, \sigma, \alpha} \epsilon_{k, \sigma, \alpha} c_{\vec{k}, \sigma, \alpha}^\dagger c_{\vec{k}, \sigma, \alpha} + E_0 \sum_{\sigma} |m, \sigma\rangle \langle m, \sigma| + \\
 & + E_{ex} \sum_{\alpha} (|m-1, \alpha\rangle \langle m-1, \alpha| + |m+1, \alpha\rangle \langle m+1, \alpha|), \quad (2.11)
 \end{aligned}$$

Modelo de Anderson de dois canais

Figura 2.5: Modelo de Anderson de dois canais em que o estado fundamental é um dubleto com m partículas e spin total $\sigma = \pm 1/2$ e dois dubletos como estados excitados, com $m \pm 1$ partículas, spin total igual a zero e com canal α .

onde o primeiro termo da direita é a banda de condução e os outros termos definem as energias dos níveis localizados $|m, \sigma\rangle$ e $|m \pm 1, \alpha\rangle$ (ver Fig. 2.5). Como os estados $|m + 1, \alpha\rangle$ e $|m - 1, \alpha\rangle$ têm a mesma energia, o modelo apresenta simetria partícula-buraco e assim podemos denominá-lo de simétrico, a exemplo do modelo tradicional de um canal.

Para definir o termo de hibridização é mais complicado. Podemos imaginar dois processos: em um deles o estado de elétron de condução com os números quânticos $\{\vec{k}, \sigma, \alpha\}$ é destruído e o estado local muda de $|m - 1, -\alpha\rangle$ para $|m, \sigma\rangle$; o spin inicial do elétron neste processo é arbitrário. O outro processo é quando o elétron de condução forma um estado singlete com $|m, \sigma\rangle$ o qual, por sua vez, muda para o estado final $|m + 1, \alpha\rangle$. Esses processos de hibridização podem ser visualizados pelos diagramas da Fig. 2.6 e são descritos pelo Hamiltoniano

$$H_V = \sum_{\vec{k}, \sigma, \alpha} V_\alpha (f_{-1, \sigma, \alpha}^\dagger c_{\vec{k}, \sigma, \alpha} + h.c.), \quad (2.12)$$

onde V_α é o acoplamento entre a impureza e o canal α (por convenção se $\alpha = 1$, $-\alpha = 2$ e vice-versa). O operador $f_{-1, \sigma, \alpha}^\dagger$ é definido assim

$$f_{-1, \sigma, \alpha}^\dagger = |m, \sigma\rangle \langle m - 1, -\alpha| + (2\sigma) |m + 1, \alpha\rangle \langle m, -\sigma|. \quad (2.13)$$

O Hamiltoniano de Anderson de dois canais que utilizamos (proposto por D. L. Cox)

Figura 2.6: Esquema de interações entre os estados da impureza e os elétrons de condução. m é o número de elétrons no orbital da impureza. $\sigma = \pm 1/2$, quando $\alpha = 1$, $-\alpha = 2$ e vice-versa. Em a) um elétron de condução (k, σ, α) se hibridiza com o estado local $(m-1, -\alpha)$ e forma o estado de spin σ . Em b) um elétron de condução $(k, -\sigma, \alpha)$ se hibridiza com o estado local (m, σ) em uma combinação singleto, resultando em estado de canal $(m+1, \alpha)$ (spin 0). Logicamente processos inversos são permitidos.

é, então, $H = H_0 + H_V$:

$$\begin{aligned}
 H = & \sum_{\vec{k}, \sigma, \alpha} \epsilon_{k, \sigma, \alpha} c_{\vec{k}, \sigma, \alpha}^\dagger c_{\vec{k}, \sigma, \alpha} + E_{ex} \sum_{\alpha} (|m-1, \alpha\rangle \langle m-1, \alpha| + |m+1, \alpha\rangle \langle m+1, \alpha|) + \\
 & + E_0 \sum_{\sigma} |m, \sigma\rangle \langle m, \sigma| + \sum_{\vec{k}, \sigma, \alpha} V_{\alpha} (f_{-1, \sigma, \alpha}^\dagger c_{\vec{k}, \sigma, \alpha} + h.c.).
 \end{aligned} \tag{2.14}$$

É fácil comparar o Modelo de Anderson tradicional (um canal) simétrico com o Modelo de Anderson de dois canais proposto por Cox. Na Fig. 2.7 mostramos o Modelo de Anderson de um canal simétrico em notação semelhante à usada no Modelo de Anderson generalizado.

Para verificar se o Hamiltoniano dado pela Eq. 2.14 descreve o Modelo de Kondo de dois canais em baixas temperaturas, demonstramos sua equivalência ao Hamiltoniano de Kondo de dois canais, Eq. 2.7, através do procedimento de Schrieffer-Wolff.

2.2.2 Transformação de Schrieffer-Wolff para dois canais

Schrieffer e Wolff [28] demonstraram que o Hamiltoniano de Kondo era um caso particular do Hamiltoniano de Anderson tradicional (um canal). Seguindo os passos de Schrieffer e Wolff, demonstramos que o Hamiltoniano de Kondo de dois canais é um caso particular

Figura 2.7: No esquema superior temos o Modelo de Anderson tradicional (um canal) na configuração de caso simétrico. Logo abaixo, temos o mesmo modelo mas agora com notação $|m, \sigma\rangle$ onde m é o número de elétrons e σ é o spin total do estado. No esquema inferior temos o Modelo de Anderson de dois canais em que o estado fundamental é um dubleto com m partículas e spin total σ e dois dubletos como estados excitados, com $m \pm 1$ partículas, spin total igual a zero e com canal α .

do Hamiltoniano de Anderson de dois canais proposto por Cox. Para isso, usamos a Eq. 2.14 da seguinte forma

$$H = H_0 + H_V \quad (2.15)$$

onde

$$H_0 = \sum_{\vec{k}, \sigma} \epsilon_k c_{\vec{k}, \sigma, \alpha}^\dagger c_{\vec{k}, \sigma, \alpha} + E_0 \sum_{\sigma} |m, \sigma\rangle \langle m, \sigma| + \quad (2.16)$$

$$+ E_{ex} \sum_{\alpha} (|m-1, \alpha\rangle \langle m-1, \alpha| + |m+1, \alpha\rangle \langle m+1, \alpha|) \quad (2.17)$$

$$H_V = \sum_{\vec{k}, \sigma, \alpha} V_{\alpha} (f_{-1, \sigma, \alpha}^\dagger c_{\vec{k}, \sigma, \alpha} + h.c.). \quad (2.18)$$

A idéia é transformar H num Hamiltoniano $\widetilde{H}$ que não contenha termos lineares em V_{α} . Essa transformação é feita utilizando-se um operador P , definido apropriadamente *a posteriori* tal que

$$\widetilde{H} = e^P H e^{-P} = H + [P, H] + \frac{1}{2!} [P, [P, H]] + \dots \quad (2.19)$$

Então,

$$\widetilde{H} = H_0 + H_V + [P, H_0] + [P, H_V] + O(V^3). \quad (2.20)$$

O operador P deve ser tal que

$$[P, H_0] = -H_V \quad (2.21)$$

e assim eliminar os termos lineares em V_{α} . Dessa forma teremos (desprezando os termos de ordem V^3 e acima),

$$\widetilde{H} = H_0 + [P, H_V]. \quad (2.22)$$

Encontramos o operador P usando dois auto-estados ($|a\rangle$ e $|b\rangle$) de H_0 . Da Eq. 2.21

temos que

$$\langle a | H_0 P - P H_0 | b \rangle = \langle a | H_V | b \rangle \quad (2.23)$$

e portanto

$$\langle a | P | b \rangle = \frac{H_{Va,b}}{E_a - E_b},$$

onde E_a e E_b são as energias dos estados $|a\rangle$ e $|b\rangle$. Multiplicando à direita por $|a\rangle$ e à esquerda por $\langle b|$ e somando em a e b temos,

$$\sum_{a,b} |a\rangle \langle a| P |b\rangle \langle b| = \sum_{a,b} \frac{H_{Va,b}}{E_a - E_b} |a\rangle \langle b|. \quad (2.24)$$

Portanto,

$$P = \sum_{a,b} \frac{H_{Va,b}}{E_a - E_b} |a\rangle \langle b|. \quad (2.25)$$

$H_{Va,b}$ conecta estados que se diferenciam apenas por uma partícula na impureza: $|m, \sigma\rangle \rightarrow |m-1, \alpha\rangle$, que corresponde à energia $\varepsilon_q - E_0 + E_{ex}$; ou $|m+1, \alpha\rangle \rightarrow |m, \sigma\rangle$, que corresponde à energia $\varepsilon_q + E_0 - E_{ex}$. Colecionando todas essas possibilidades construímos o operador P da forma da Eq. (2.25) resultando em:

$$P = \sum_{q\mu\beta} V_\beta \left[\left(\frac{|m-1, -\beta\rangle \langle m\mu|}{\varepsilon_q - E_0 + E_{ex}} + (2\mu) \frac{|m, -\mu\rangle \langle m+1, \beta|}{\varepsilon_q - E_{ex} + E_0} \right) c_{\vec{q}, \mu, \beta} - h.c. \right], \quad (2.26)$$

onde q indica momento, μ indica spin e β indica canal.

Para demonstrar que o operador P satisfaz à condição $[P, H_0] = -H_V$ imposta anteriormente basta considerarmos que, como é usual na transformação Schrieffer-Wolff, apenas as energias de excitação da banda próximas à energia de Fermi são importantes, ou seja, $\varepsilon_k, \varepsilon_q \sim 0$ ($q, k \sim k_F$). Devemos observar que $\left[|m, \sigma\rangle \langle m, \sigma|, c_{\vec{k}, \chi, \beta} \right] = 0$, pois $|m, \sigma\rangle \langle m, \sigma|$ não cria ou destrói elétron, e que $\left\{ |m \pm 1, \alpha\rangle \langle m, \sigma|, c_{\vec{k}, \chi, \beta} \right\} = 0$ pois $|m \pm 1, \alpha\rangle \langle m, \sigma|$ cria ou destrói um elétron.

O comutador $[P, H_V]$ resulta em

$$[P, H_V] = \sum_{\vec{k}, \sigma, \alpha} \frac{-2V_\alpha^2}{E_{ex} - E_0} |m, \sigma\rangle \langle m, -\sigma| \left(c_{\vec{k}, -\sigma, \alpha}^\dagger c_{\vec{k}, \sigma, \alpha} + c_{\vec{k}, \sigma, \alpha}^\dagger c_{\vec{k}, -\sigma, \alpha} \right), \quad (2.27)$$

que, usando notação conveniente, pode ser escrito da seguinte forma:

$$[P, H_V] = \sum_{\sigma, \alpha} J_\alpha \vec{S} \cdot \vec{s}_\alpha, \quad (2.28)$$

onde

$$\vec{s}_\alpha = \sum_{\vec{k}, \vec{q}} c_{\vec{k}, \mu, \alpha}^\dagger \frac{\vec{\sigma}_{\mu, \nu}}{2} c_{\vec{q}, \nu, \alpha}, \quad (2.29)$$

$$\vec{S} = \langle m\mu | \frac{\vec{\sigma}_{\mu, \nu}}{2} | m\nu \rangle, \quad (2.30)$$

$$J_\alpha = \frac{8V_\alpha^2}{E_{ex} - E_0}, \quad (2.31)$$

sendo $\vec{\sigma}_{\mu, \nu}$ matrizes de Pauli.

Finalmente a Eq. 2.20 fica

$$\widetilde{H} \cong H_0 + \sum_{\alpha} J_\alpha \vec{s}_\alpha \cdot \vec{S}. \quad (2.32)$$

A Eq. 2.32 é equivalente à Eq. 2.7 e representa a forma do Hamiltoniano de Kondo de dois canais. Quando $E_{ex} > E_0$ o acoplamento J_α da impureza com a banda é antiferromagnético, como no Modelo de Kondo usual.

Portanto, o Hamiltoniano dado pela Eq. 2.14 descreve o Modelo de Kondo de dois canais.

No próximo capítulo aplicaremos a técnica do Grupo de Renormalização Numérico para diagonalizar o Hamiltoniano 2.14.

Capítulo 3

Diagonalização do Hamiltoniano de Anderson de dois canais pelo GRN

Nesta tese utilizamos o GRN para a diagonalização do Hamiltoniano de Anderson de dois canais. Essa técnica estabelece uma transformação no Hamiltoniano que a cada passo acrescenta uma escala de energia ao problema. Constrói-se um método iterativo em que o Hamiltoniano H é diagonalizado numericamente em cada iteração. Nas próximas seções detalhamos a aplicação do GRN no Hamiltoniano de Anderson de dois canais.

3.1 Grupo de Renormalização Numérico: histórico

O Grupo de Renormalização Numérico (GRN) surgiu em meados de 1970, quando K. G. Wilson, formalizando um conjunto de idéias de *scaling*, investigou expoentes críticos em transições de fase de segunda ordem [35, 36]. Posteriormente Wilson aplicou esta técnica no problema Kondo, utilizando cálculos numéricos na diagonalização de matrizes [15]. Usando o mesmo procedimento Krishna-murthy, Wilson e Wilkins investigaram o Hamiltoniano de Anderson tradicional [19], sendo estes dois artigos considerados como base do GRN. Desde então uma série de trabalhos foram executados com esta técnica [37, 38, 39], etc.

Importante avanço no GRN foi proposto no trabalho de Yoshida, Oliveira e colaboradores, que consiste no uso de mais um parâmetro de discretização da banda de condução [20], como veremos adiante. Este novo parâmetro mostrou-se útil também para o cálculo de propriedades termodinâmicas como suscetibilidade magnética e calor específico [21, 22].

3.2 Hamiltoniano de Anderson de dois canais

Para maior clareza reproduzimos o Hamiltoniano de Anderson de dois canais (HDC) dado pela Eq.2.14,

$$\begin{aligned}
H = & \sum_{k,\sigma,\alpha} \varepsilon_k c_{\vec{k},\sigma,\alpha}^\dagger c_{\vec{k},\sigma,\alpha} + E_{ex} \sum_{\alpha} (|m-1, \alpha\rangle \langle m-1, \alpha| + |m+1, \alpha\rangle \langle m+1, \alpha|) + \\
& + E_0 \sum_{\sigma} |m, \sigma\rangle \langle m, \sigma| + \sum_{k,\sigma,\alpha} V_{\alpha} (f_{-1,\sigma,\alpha}^\dagger c_{\vec{k},\sigma,\alpha} + h.c.).
\end{aligned} \tag{3.1}$$

No Capítulo 2 explicamos detalhadamente as componentes deste Hamiltoniano, portanto aqui fazemos apenas uma breve descrição:

- Consideramos a banda de condução do metal como sendo um contínuo de estado de largura $2D$, semi-preenchida e isotrópica, isto é, $\varepsilon_{\vec{k}} = \varepsilon_k$ (Fig.3.1).
- $c_{\vec{k},\sigma,\alpha}^\dagger$ cria um elétron na banda de condução do metal com momentum $\vec{k}$, spin $\sigma = \pm 1/2$, canal $\alpha = 1$ ou 2 e energia ε_k ;
- $|m, \sigma\rangle$ é um estado da impureza denominado de *estado de spin*, tem m elétrons, spin total $\sigma = \pm 1/2$ e energia E_0 ;
- $|m \pm 1, \alpha\rangle$ é um estado da impureza que tem $m \pm 1$ elétrons, spin total zero, acoplado com o canal $\alpha = 1$ ou 2 e energia E_{ex} . Adiante mostraremos que a combinação $|m+1, \alpha\rangle$ e $|m-1, -\alpha\rangle$ forma aquilo que denominamos *estado de domínio do canal* α ($\alpha = 1 \rightarrow -\alpha = 2$ e $\alpha = 2 \rightarrow -\alpha = 1$)
- $f_{-1,\sigma,\alpha}^\dagger$ é o que denominamos de *operador de hibridização*, sendo responsável pela

mudança de estado da impureza. É definido pela expressão

$$f_{-1,\sigma,\alpha}^\dagger = |m, \sigma\rangle \langle m-1, -\alpha| + (2\sigma) |m+1, \alpha\rangle \langle m, -\sigma|; \quad (3.2)$$

O operador $f_{-1,\sigma,\alpha}$ não é exatamente fermiônico uma vez que

$$\begin{aligned} \{f_{-1,\sigma,\alpha}^\dagger, f_{-1,\sigma',\alpha'}\} &= \delta_{\alpha,\alpha'} (|m, \sigma\rangle \langle m, \sigma'| + 4\sigma\sigma' |m, -\sigma'\rangle \langle m, -\sigma|) \\ &+ \delta_{\sigma,\sigma'} (|m-1, -\alpha'\rangle \langle m-1, -\alpha| + \\ &+ 4\sigma\sigma' |m+1, \alpha\rangle \langle m+1, \alpha'|) \end{aligned} \quad (3.3)$$

é zero somente para $\sigma \neq \sigma'$, independente dos canais. E também,

$$\begin{aligned} \{f_{-1,\sigma,\alpha}, f_{-1,\sigma',\alpha'}\} &= 2\sigma\delta_{-\sigma,\sigma'} |m-1, -\alpha'\rangle \langle m+1, \alpha| + \\ &+ 2\sigma'\delta_{-\sigma',\sigma} |m-1, -\alpha\rangle \langle m+1, \alpha'| \end{aligned} \quad (3.4)$$

é zero somente para $\sigma = \sigma'$ ou $\alpha = \alpha'$. Uma vez que $f_{-1,\sigma,\alpha}^\dagger$ cria uma partícula nós estabelecemos que este operador muda de sinal quando troca de posição com outro operador fermiônico.

- V_α é o elemento de matriz de acoplamento entre o estado de spin e o estado de canal α da impureza. V_1 e V_2 podem ser iguais ou diferentes.
- Quando $V_1 \neq V_2$ dizemos que o sistema que está no *regime anisotrópico*.
- Quando $V_1 = V_2$ o sistema está no *regime isotrópico*.

3.3 Discretização logarítmica

Para se estabelecer o método iterativo do GRN no Hamiltoniano de Anderson de dois canais (HDC) temos que desenvolver uma relação de recorrência que permita obter os elementos de matriz de H_N conhecendo os autovalores e autovetores da iteração anterior

Figura 3.1: a) Banda de condução com largura $2D$, semi-preenchida e isotrópica. b) A banda é discretizada logaritmicamente pelos parâmetros $\Lambda > 1$, sendo Λ um número inteiro, e $z > 0$ onde z é um número real. O primeiro intervalo é $1 < \varepsilon_k < \Lambda^{-z}$ e os demais são obtidos pela divisão por Λ (para o lado negativo da banda o procedimento é análogo). c) Multiplicando por Λ^n , n inteiro positivo, a estrutura de níveis de mais baixa energia (próximos ao nível de Fermi) não muda.

($H_N = \Im[H_{N-1}]$ onde N é o passo da iteração) [15]. Para isso devemos trabalhar em uma base discreta de operadores e portanto temos que discretizar a banda de condução do metal. Uma característica da banda contínua é sua invariância por uma mudança de escala nas energias em torno do nível de Fermi. Para manter essa propriedade, pelo menos próximo ao nível de Fermi, a banda é discretizada logaritmicamente como mostrado na Fig.3.1. Neste trabalho usamos o GRN em sua forma generalizada [20], que consiste no uso do parâmetro z , além do parâmetro Λ , na discretização logarítmica (Λ é um número inteiro positivo maior que a unidade e z é um número racional não negativo). No GRN tradicional de Wilson ([15]) só se usa o parâmetro Λ e pode ser considerado como um caso particular em que $z = 1$.

Podemos representar HDC na forma $H = H_b + H_{imp}$ onde H_b é a banda de condução do metal ($\sum_{k,\sigma,\alpha} \varepsilon_k c_{\vec{k},\sigma,\alpha}^\dagger c_{\vec{k},\sigma,\alpha}$) e H_{imp} representa a impureza. A idéia é modificar HDC em duas etapas: na primeira fazemos com que os elétrons de condução se acoplem orde-

nadadamente com a impureza, da maior escala de energia para a menor, e não mais indiscriminadamente como expresso por HDC; a segunda etapa é escrever o Hamiltoniano em uma base de operadores de Lanczos, isto é, operadores sequenciais f_n ($n = 0, 1, 2, \dots$) [40]. A característica principal desta base é que apenas operadores subsequentes se acoplam entre si, ou seja, o operador f_n se acopla somente com f_{n-1} e f_{n+1} ; f_0 é o único a se acoplar com a impureza (H_{imp}).

3.3.1 Primeira etapa da discretização

Como a banda é isotrópica as energias dos elétrons só dependem do módulo do momento. Por isso vamos linearizar o HDC, deixando-o em função da energia. Expandimos ε_k em torno de ε_{Fermi} e estabelecemos que o nível de Fermi tem energia zero ($-D < \varepsilon_k < D$). Usando a variável adimensional $\varepsilon \equiv \varepsilon_k/D$ substituímos $c_{\vec{k},\sigma,\alpha}$ pelos operadores $c_{\varepsilon,\sigma,\alpha}$, que obedecem à relação de anticomutação $\{c_{\varepsilon,\sigma,\alpha}^\dagger, c_{\varepsilon',\sigma,\alpha}\} = \delta(\varepsilon - \varepsilon')/\sqrt{\rho(\varepsilon)}$ (maiores detalhes podem ser vistos nas referências [41, 31]). Simplificação semelhante fazemos na densidade de estados da banda de condução, obtendo $\rho_0(\varepsilon) = 1/(2D)$. O Hamiltoniano de dois canais (Eq. 3.1) fica

$$\begin{aligned} \frac{H}{D} = & \sum_{\sigma,\alpha} \int_{-1}^1 \varepsilon c_{\varepsilon,\sigma,\alpha}^\dagger c_{\varepsilon,\sigma,\alpha} d\varepsilon + \frac{E_{ex}}{D} \sum_{\alpha} (|m-1, \alpha\rangle \langle m-1, \alpha| + |m+1, \alpha\rangle \langle m+1, \alpha|) + \\ & + \frac{E_0}{D} \sum_{\sigma} |m, \sigma\rangle \langle m, \sigma| + \sum_{\sigma,\alpha} V_{\alpha} \sqrt{\frac{\rho_0}{D}} \int_{-1}^1 (f_{-1,\sigma,\alpha}^\dagger c_{\varepsilon,\sigma,\alpha} + h.c.) d\varepsilon. \end{aligned} \quad (3.5)$$

Devemos construir uma nova base de operadores para os elétrons de condução que sejam discretos e respeitem a discretização da banda, isto é, $\Lambda^{-(z+n+1)} < \varepsilon < \Lambda^{-(z+n)}$, onde $n = 0, 1, 2, \dots$. O passo seguinte já é padrão no GRN e está bem detalhado nas referências [15, 41, 31, 30]. Portanto, vamos apresentar aqui apenas os conceitos gerais envolvidos. Devido à simetria da banda em torno do nível de Fermi, o lado positivo e o negativo da banda são tratados de maneira análoga. Em cada intervalo os elétrons são representados por ondas planas com energia igual à energia média do intervalo. Impondo normalização e condições periódicas de contorno se definem as constantes necessárias,

permitindo que se estabeleça um conjunto de ondas planas em cada intervalo da banda de condução. A partir desse conjunto de ondas planas e dos operadores contínuos $c_{\varepsilon,\sigma,\alpha}^\dagger$ estabelecemos a base $\{a_{m,p,\sigma,\alpha}^\dagger, b_{m,p,\sigma,\alpha}^\dagger\}$ (operadores discretos que criam elétrons em cada intervalo):

$$a_{n,p,\sigma,\alpha}^\dagger = \frac{\Lambda^{(z+n)/2}}{D(1-\Lambda^{-1})^{1/2}} \int_{-1}^1 e^{i w_n p k} c_{\varepsilon,\sigma,\alpha}^\dagger d\varepsilon, \quad \Lambda^{-(z+n+1)} < \varepsilon < \Lambda^{-(z+n)}, \quad (3.6)$$

onde p é um inteiro, $w_n = 2\pi\Lambda^{z+n}/(1-\Lambda^{-1})$ e $c_{\varepsilon,\sigma,\alpha}^\dagger$ cria um estado em torno da impureza. Para o lado negativo da banda de condução ($-\Lambda^{-(z+n)} < \varepsilon < -\Lambda^{-(z+n+1)}$) definimos os operadores $b_{m,p,\sigma,\alpha}^\dagger$ de maneira análoga. Esta base $\{a_{n,p,\sigma,\alpha}^\dagger, b_{n,p,\sigma,\alpha}^\dagger\}$ é discreta, infinita e todos os seus termos se acoplam com a impureza. Wilson, Krishna-murthy e Wilkins [15, 19] constataram que desprezar os operadores com $p \neq 0$ é uma boa aproximação. Fazendo $p = 0$ e omitindo esse índice, a base $\{a_{n,\sigma,\alpha}^\dagger, b_{n,\sigma,\alpha}^\dagger\}$ pode ser usada para reescrever HDC, obtendo

$$\begin{aligned} \frac{H}{D} &= \sum_{\sigma,\alpha} \frac{1+\Lambda^{-z}}{2} (a_{\sigma,\alpha}^\dagger a_{\sigma,\alpha} + b_{\sigma,\alpha}^\dagger b_{\sigma,\alpha}) + \frac{1+\Lambda^{-1}}{2} \sum_{\sigma,\alpha,n=0}^{\infty} \Lambda^{n+z} (a_{n,\sigma,\alpha}^\dagger a_{n,\sigma,\alpha} + b_{n,\sigma,\alpha}^\dagger b_{n,\sigma,\alpha}) \\ &+ \frac{E_{ex}}{D} \sum_{\alpha} (|m-1, \alpha\rangle\langle m-1, \alpha| + |m+1, \alpha\rangle\langle m+1, \alpha|) + \frac{E_0}{D} \sum_{\sigma} |m, \sigma\rangle\langle m, \sigma| + \\ &+ \sum_{\sigma,\alpha} V_{\alpha} \sqrt{\frac{2\rho_0}{D}} (f_{-1,\sigma,\alpha}^\dagger f_{0,\sigma,\alpha} + h.c.). \end{aligned} \quad (3.7)$$

onde $f_{0,\sigma,\alpha}$ é definido por

$$\begin{aligned} f_{0,\sigma,\alpha} \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} \int_{-1}^1 c_{\varepsilon,\sigma,\alpha}^\dagger d\varepsilon &= \left(\frac{1-\Lambda^{-z}}{2} \right)^{\frac{1}{2}} (a_{\sigma,\alpha} + b_{\sigma,\alpha}) + \\ &+ \left(\frac{1-\Lambda^{-1}}{2} \right)^{\frac{1}{2}} \sum_{n=0}^{\infty} \Lambda^{-\frac{n+z}{2}} (a_{n,\sigma,\alpha} + b_{n,\sigma,\alpha}). \end{aligned} \quad (3.8)$$

O primeiro termo da Eq. 3.7 surge devido ao intervalo do topo da banda [31]. Salientamos que toda a interação entre a impureza e os elétrons de condução está representado pelo termo $f_{-1,\sigma,\alpha}^\dagger f_{0,\sigma,\alpha} + h.c.$, e que agora, devido ao termo $\sum_{n=0}^{\infty} \Lambda^{-\frac{n+z}{2}} (a_{n,\sigma,\alpha} + b_{n,\sigma,\alpha})$,

o acoplamento dos elétrons de condução com a impureza é feito ordenadamente: primeiro os de mais alta energia seguido pelos elétrons de mais baixa.

Em linhas gerais, utilizando séries de Fourier definimos um conjunto completo de funções ortogonais no espaço ε em cada um dos intervalos de energia da banda discretizada. A etapa seguinte é descrever os termos que representam a banda de condução do metal por operadores de Lanczos, $f_{n,\sigma,\alpha}$ ($n = 1, 2, \dots$), já tendo definido $f_{0,\sigma,\alpha}$.

3.3.2 Segunda etapa da discretização

Uma nova base $\{f_{n,\sigma,\alpha}^\dagger\}$ é construída por transformação unitária (transformação de Lanczos [40]) de tal modo que a banda de condução fique na forma tridiagonal. Este procedimento está detalhado na referência [42] e o resultado é a seguinte forma tridiagonal

$$H_b = \frac{D(1 + \Lambda^{-1})}{2} \sum_{\alpha,\sigma,n=0}^{\infty} \epsilon_n^z \left(f_{n,\sigma,\alpha}^\dagger f_{n+1,\sigma,\alpha} + f_{n+1,\sigma,\alpha}^\dagger f_{n,\sigma,\alpha} \right), \quad (3.9)$$

sendo que os valores ϵ_n^z são encontrados numericamente através de um procedimento recursivo. Para valores grandes de n , ϵ_n^z se aproxima assintoticamente da expressão

$$\epsilon_n^z = \Lambda^{1-z-n/2}, \quad n \gg 0. \quad (3.10)$$

Para o caso específico de $z = 1$ existe uma fórmula analítica desenvolvida por Wilson [15]. Na base $\{a_{n,\sigma,\alpha}^\dagger, b_{n,\sigma,\alpha}^\dagger\}$, que é discreta e infinita, todos os termos se acoplam com a impureza. Já na base $\{f_{n,\sigma,\alpha}^\dagger\}$, que também é discreta e infinita, somente $f_{0,\sigma,\alpha}^\dagger$ se acopla com a impureza; os demais operadores se acoplam somente com os operadores mais próximos: $f_{n,\sigma,\alpha}^\dagger$ se acopla com $f_{n+1,\sigma,\alpha}^\dagger$ e com $f_{n-1,\sigma,\alpha}^\dagger$ (ver Fig. 3.2)

Agora podemos truncar o Hamiltoniano definindo um valor máximo para n (todo acoplamento com a impureza está no operador $f_{0,\sigma,\alpha}^\dagger$). O erro introduzido pelo truncamento é independente dos parâmetros referentes à impureza E_0 , E_{ex} e V_α , nesse sentido se afirma que o GRN é um método não perturbativo. Denominemos o valor máximo de n

Figura 3.2: Do trabalho de Krishna-murthy retiramos estas três figuras que representam as bases dos operadores da banda de condução. a) Base de operadores $c_{\epsilon,\sigma,\alpha}$, onde os estados têm energia bem definida mas são delocalizados espacialmente. A impureza está localizada em $r = 0$. b) Base de operadores $\{a_{n,\sigma,\alpha}^\dagger, b_{n,\sigma,\alpha}^\dagger\}$ onde as energias dos estados estão restritas aos valores médios de cada intervalo. Veja que quanto maior é a energia associada aos operadores a e b , mais em torno da impureza eles são (as caixas de tamanhos diferentes mas rasuradas da mesma forma representam o mesmo par de operadores). c) Base de operadores $\{f_{n,\sigma,\alpha}^\dagger\}$ onde os estados somente se acoplam com estados vizinhos de acordo com a transformação de Lanczos. f_0 é o estado mais localizado espacialmente em torno da impureza, mas é o menos localizado no espaço das energias. O oposto ocorre para n grande.

por N . Esse valor é escolhido de acordo com a escala de energia de interesse, que no caso de propriedades termodinâmicas é $\varepsilon_T = K_B T$, onde K_B é a constante de Boltzmann e T a temperatura. Escalas de energia muito menores podem ser descartadas de modo que o erro introduzido é perfeitamente controlado. Assim o valor máximo N deve ser tal que a menor escala de energia ε_N seja

$$\varepsilon_N \ll \varepsilon_T \Rightarrow \frac{D(1 + \Lambda^{-1})}{2} \Lambda^{1-z-N/2} \ll K_B T \quad (3.11)$$

e podemos restringir o Hamiltoniano H_b até $N - 1$, resultando em

$$H_b = \frac{D(1 + \Lambda^{-1})}{2} \sum_{\alpha, \sigma, n=0}^{N-1} \epsilon_n \left(f_{n, \sigma, \alpha}^\dagger f_{n+1, \sigma, \alpha} + f_{n+1, \sigma, \alpha}^\dagger f_{n, \sigma, \alpha} \right). \quad (3.12)$$

O menor valor de energia é então $\varepsilon_{N-1} = D(1 + \Lambda^{-1}) \Lambda^{1-z-(N-1)/2}/2$. Por facilidades no cálculo numérico é interessante que o menor valor de energia seja da ordem de 1 e isso é conseguido dividindo H_b por $D(1 + \Lambda^{-1}) \Lambda^{-(N-1)/2}/2$. Fazendo a seguinte economia de notações $\eta = 2/[D(1 + \Lambda^{-1})]$, $\eta E_0 \rightarrow E_0$, $\eta E_{ex} \rightarrow E_{ex}$ e $\eta V_\alpha \sqrt{2\rho_0/D} \rightarrow V_\alpha$, H_N (Eq. 3.7) é escrito como

$$\begin{aligned} H_N = & \Lambda^{\frac{N-1}{2}} \left\{ \sum_{\alpha, \sigma, n=0}^{N-1} \epsilon_n (f_{n\sigma\alpha}^\dagger f_{n+1\sigma\alpha} + h.c.) + \right. \\ & + \sum_{\sigma, \alpha} V_\alpha (f_{-1, \sigma, \alpha}^\dagger f_{0, \sigma, \alpha} + h.c.) + E_0 \sum_{\sigma} |m, \sigma\rangle \langle m, \sigma| \\ & + E_{ex} \sum_{\alpha} (|m-1, \alpha\rangle \langle m-1, \alpha| + |m+1, \alpha\rangle \langle m+1, \alpha|), \end{aligned} \quad (3.13)$$

Para recuperarmos o Hamiltoniano original basta fazermos o limite,

$$H = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{D(1 + \Lambda^{-1})}{2} \Lambda^{-(N-1)} H_N. \quad (3.14)$$

Na seção seguinte estudaremos as simetrias do Hamiltoniano de Anderson de dois canais, que facilitarão a sua diagonalização.

3.4 Simetrias

O Hamiltoniano (3.13) conserva carga axial J_α em cada canal [43]. E também tem simetria partícula-buraco (a operação $f_{n,\sigma,\alpha} \rightarrow 2\sigma(-1)^n f_{n,-\sigma,\alpha}^\dagger$ resulta em $H \rightarrow H$, $J_{\alpha,z} \rightarrow -J_{\alpha,z}$ e $J_\pm \rightarrow -J_\mp$). Usaremos os autovalores do operador J_α como números quânticos (j_α) para descrever os estados do sistema. Definimos os operadores J_α da seguinte forma:

$$\begin{aligned} 2J_\alpha^z &= |m+1, \alpha\rangle\langle m+1, \alpha| - |m-1, -\alpha\rangle\langle m-1, -\alpha| + \sum_{n=0}^N (f_{n\uparrow\alpha}^\dagger f_{n\uparrow\alpha} - f_{n\downarrow\alpha} f_{n\downarrow\alpha}^\dagger) \\ &= \sum_{n=-1}^N (f_{n\uparrow\alpha}^\dagger f_{n\uparrow\alpha} - f_{n\downarrow\alpha} f_{n\downarrow\alpha}^\dagger) \end{aligned} \quad (3.15)$$

$$J_\alpha^+ = |m+1, \alpha\rangle\langle m-1, -\alpha| + \sum_{n=0}^N (-1)^n f_{n\uparrow\alpha}^\dagger f_{n\downarrow\alpha}^\dagger = \sum_{n=-1}^N (-1)^n f_{n\uparrow\alpha}^\dagger f_{n\downarrow\alpha}^\dagger \quad (3.16)$$

$$J_\alpha^- = |m-1, -\alpha\rangle\langle m+1, \alpha| + \sum_{n=0}^N (-1)^n f_{n\downarrow\alpha} f_{n\uparrow\alpha} = \sum_{n=-1}^N (-1)^n f_{n\downarrow\alpha} f_{n\uparrow\alpha}. \quad (3.17)$$

Ao contrário da carga axial, o spin não é conservado em cada canal separadamente. Mas o spin total S é e comuta com J_α . Isso nos permite também usar seus autovalores s como número quântico para descrever os estados do sistema. O operador de spin é definido pelas expressões:

$$\begin{aligned} 2S^z &= |m, \uparrow\rangle\langle m, \uparrow| - |m, \downarrow\rangle\langle m, \downarrow| + \sum_{n,\alpha} (f_{n\uparrow\alpha}^\dagger f_{n\uparrow\alpha} - f_{n\downarrow\alpha}^\dagger f_{n\downarrow\alpha}) \\ &= \sum_{n=-1,\alpha}^N (f_{n\uparrow\alpha}^\dagger f_{n\uparrow\alpha} - f_{n\downarrow\alpha}^\dagger f_{n\downarrow\alpha}) \end{aligned} \quad (3.18)$$

$$S_+ = |m, \uparrow\rangle\langle m, \downarrow| + \sum_{n,\alpha} f_{n\uparrow\alpha}^\dagger f_{n\downarrow\alpha} = \sum_{n=-1,\alpha}^N f_{n\uparrow\alpha}^\dagger f_{n\downarrow\alpha} \quad (3.19)$$

$$S_- = |m, \downarrow\rangle\langle m, \uparrow| + \sum_{n,\alpha} f_{n\downarrow\alpha}^\dagger f_{n\uparrow\alpha} = \sum_{n=-1,\alpha}^N f_{n\downarrow\alpha}^\dagger f_{n\uparrow\alpha}. \quad (3.20)$$

O seguinte operador (que denominamos de flavor) também comuta com o Hamiltoniano ($[H, F_z] = 0$ e $[H, F^2] = 0$):

$$2F_z = \sum_{n=-1,\sigma} (f_{n,\sigma,2}^\dagger f_{n,\sigma,2} - f_{n,\sigma,1}^\dagger f_{n,\sigma,1}), \quad (3.21)$$

$$F_+ = \sum_{n=-1,\sigma} f_{n,\sigma,2}^\dagger f_{n,\sigma,1} = F_-^\dagger. \quad (3.22)$$

Infelizmente ele não comuta com J_α e portanto não foi utilizado neste trabalho.

Os operadores $f_{n,\sigma,\alpha}^\dagger$ e $f_{n,\sigma,\alpha}$ são componentes de um tensor de ordem $1/2$. Para demonstrar isso lembramos que a componente q de um tensor de ordem k é definido pelas expressões [44]

$$[J_z, T(k, q)] = q T(k, q) \quad (3.23)$$

$$[J_\pm, T(k, q)] = A(k, \mp q) T(k, q \pm 1), \quad (3.24)$$

onde, em nosso caso, J_z é a carga axial. Os resultados são os seguintes comutadores:

$$[J_z^\alpha, f_{n,\sigma,\alpha}^\dagger] = f_{n,\sigma,\alpha}^\dagger \quad (3.25)$$

$$[J_z^\alpha, f_{n,\sigma,\alpha}] = -f_{n,\sigma,\alpha} \quad (3.26)$$

$$[J_-^\alpha, f_{n,\sigma,\alpha}^\dagger] = (-1)^n (2\sigma) f_{n,-\sigma,\alpha}. \quad (3.27)$$

Dessa forma definimos o seguinte tensor

$$\begin{pmatrix} f_{n,\sigma,\alpha}^\dagger \\ (-1)^n (2\sigma) f_{n,-\sigma,\alpha} \end{pmatrix}, \quad (3.28)$$

onde $f_{n,\sigma,\alpha}^\dagger$ é a componente $q = 1/2$, e $(-1)^n (2\sigma) f_{n,-\sigma,\alpha}$ é a componente $q = -1/2$.

Podemos, então, usar o Teorema de Wigner-Eckart [44] para desmembrar os estados do sistema

$$\langle j', m' | T(k, q) | j, m \rangle = \langle j, m; k, q | j', m' \rangle \langle j' || T_K || j \rangle. \quad (3.29)$$

O primeiro elemento de matriz à direita da igualdade é o coeficiente de Clebsh-Gordon para adição da componente q de um momento angular k , com a componente m do momento angular j , resultando em um momento angular j' com componente m' . O segundo termo à direita da igualdade é o elemento de matriz invariante, que independe das com-

ponentes z do tensor. Em nosso caso, como temos os números quânticos j_1 , j_2 e s , resulta em

$$\begin{aligned} & \langle j'_1, j'_{1z}, j'_2, j'_{2z}, s', s'_z | f_{n,\sigma,\alpha}^\dagger | j_1, j_{1z}, j_2, j_{2z}, s, s_z \rangle = \\ & \left\langle j_\alpha, j_{\alpha z}; \frac{1}{2}, \frac{1}{2} | j'_\alpha, j'_{\alpha z} \right\rangle \left\langle s, s_z; \frac{1}{2}, \sigma | s, s \right\rangle \langle j'_1, j'_2, s | \alpha | j_1, j_2, s \rangle \end{aligned} \quad (3.30)$$

para $q = 1/2$, e

$$\begin{aligned} & \langle j'_1, j'_{1z}, j'_2, j'_{2z}, s, s | (-1)^n (-2\sigma) f_{n,\sigma,\alpha} | j_1, j_{1z}, j_2, j_{2z}, s, s_z \rangle = \\ & \left\langle j_\alpha, j_{\alpha z}; \frac{1}{2}, \frac{-1}{2} | j'_\alpha, j'_{\alpha z} \right\rangle \left\langle s, s_z; \frac{1}{2}, -\sigma | s, s \right\rangle \langle j'_1, j'_2, s | \alpha | j_1, j_2, s \rangle \end{aligned} \quad (3.31)$$

para $q = -1/2$.

Dessa forma, usamos os números quânticos da carga axial do canal 1 (j_1), do canal 2 (j_2) e do spin total (s) para representar os estados da base de H_N .

3.5 Diagonalização iterativa

A transformação do Grupo de Renormalização Numérico é dada pela expressão (Eq. 3.32)

$$H_N = \sqrt{\Lambda} H_{N-1} + \xi_{N-1} (f_{N-1,\sigma,\alpha}^\dagger f_{N,\sigma,\alpha} + f_{N,\sigma,\alpha}^\dagger f_{N-1,\sigma,\alpha}), \quad (3.32)$$

onde $\xi_{N-1} = \Lambda^{(N-1)/2} \epsilon_{N-1}$, com $\xi_{-1,\alpha} = \Lambda^{-1/2} V_\alpha$ e somas sobre α e σ subentendidas. A Eq. 3.32 é a transformação do GRN, e que permite a diagonalização iterativa do Hamiltoniano. Esta transformação é muito importante na diagonalização do Hamiltoniano de muitos-corpos H_N pois define um processo iterativo, o qual começa pela diagonalização analítica de H_{-1} , obtido através da Eq. 3.13

$$\begin{aligned} H_{-1} &= \sum_{\sigma,\alpha} V_\alpha (f_{-1,\sigma,\alpha}^\dagger f_{0,\sigma,\alpha} + h.c.) + E_0 \sum_{\sigma} |m, \sigma\rangle \langle m, \sigma| \\ &+ E_{ex} \sum_{\alpha} (|m-1, \alpha\rangle \langle m-1, \alpha| + |m+1, \alpha\rangle \langle m+1, \alpha|), \end{aligned} \quad (3.33)$$

Os auto-estados de H_{-1} são usados para construir a base de vetores onde o Hamiltoniano da iteração seguinte pode ser diagonalizado. O processo continua até atingir um valor de N que corresponda à escala de energia desejada. As simetrias são usadas em todos os passos para se encontrar os vetores da base que são auto-estados dos operadores J_1 , J_2 e S . Os vetores de base em cada iteração N são construídos pelo produto direto dos auto-estados da iteração anterior com os estados dos elétrons de condução em cada canal.

3.5.1 Os vetores da base

Os vetores de base da iteração N são obtidos multiplicando-se cada auto-estado da iteração anterior ($N - 1$) por um dos 16 *estados de canal*. Cada canal pode estar em um dos seguintes estados $|\uparrow\downarrow\rangle$, $|0\rangle$, $|\uparrow\rangle$ ou $|\downarrow\rangle$, que juntos resultam em 16 auto-estados dos operadores J_1^2 , J_{1z} , J_2^2 , J_{2z} , S^2 e S_z . Na Tabela 3.1 apresentamos os estados de canais reunidos em 4 grupos; os elementos dentro de um mesmo grupo apresentam os mesmos números quânticos (para diferenciá-los usou-se o índice r).

Cada auto-estado da iteração $N - 1$ ($|j'_1, j'_2, s'\rangle_{N-1}$) tem que ser combinado com esses estados de canal para construir a base da iteração N , de tal modo que os vetores desta base também sejam auto-estados dos operadores $J_1^2, J_{1z}, J_2^2, J_{2z}, S^2$ e S_z . A Tabela 3.2 lista os procedimentos para, a partir dos auto-estados $|j'_1, j'_2, s'\rangle_{N-1}$, construir um vetor $|j_1, j_2, s\rangle_N$. Ao todo são 16 procedimentos possíveis e cada um deles recebe uma denominação (um número) que chamamos de *tipo*. É importante observar que auto-estados $|j'_1, j'_2, s'\rangle_{N-1}$ diferentes podem resultar em vetores com os mesmos números quânticos, que devem ser agrupados para formar um estado da base da iteração N .

Por exemplo, vamos construir um estado da iteração N usando os auto-estados da iteração anterior $N - 1$ através do procedimento *tipo 3* da Tabela 3.2,

$$|j_1, j_{1z}, j_2, j_{2z}, s, s_z; 3\rangle_N = ?$$

r	$ canal\ 1, canal\ 2\rangle$	j_1, j_2, s
1	$ \uparrow\downarrow, \uparrow\downarrow\rangle$	$1/2, 1/2, 0$
2	$(-1)^N \uparrow\downarrow, 0\rangle$	$1/2, 1/2, 0$
3	$(-1)^N 0, \uparrow\downarrow\rangle$	$1/2, 1/2, 0$
4	$ 0, 0\rangle$	$1/2, 1/2, 0$
1	$ \uparrow, 0\rangle$	$0, 1/2, 1/2$
2	$(-1)^N \uparrow, \uparrow\downarrow\rangle$	$0, 1/2, 1/2$
3	$ \downarrow, 0\rangle$	$0, 1/2, 1/2$
4	$(-1)^N \downarrow, \uparrow\downarrow\rangle$	$0, 1/2, 1/2$
1	$(-1)^N \uparrow\downarrow, \uparrow\rangle$	$1/2, 0, 1/2$
2	$ 0, \uparrow\rangle$	$1/2, 0, 1/2$
3	$(-1)^N \uparrow\downarrow, \downarrow\rangle$	$1/2, 0, 1/2$
4	$ 0, \downarrow\rangle$	$1/2, 0, 1/2$
1	$ \uparrow, \uparrow\rangle$	$0, 0, 1$
2	$\frac{1}{\sqrt{2}}(\uparrow, \downarrow\rangle + \downarrow, \uparrow\rangle)$	$0, 0, 1$
3	$ \downarrow, \downarrow\rangle$	$0, 0, 1$
4	$\frac{1}{\sqrt{2}}(\uparrow, \downarrow\rangle - \downarrow, \uparrow\rangle)$	$0, 0, 1$

Tabela 3.1: Vetores formados pelas combinações dos estados de cada canal. Vetores com mesmos números quânticos estão no mesmo grupo, diferenciados pelo índice r . Devido à definição de carga axial 3.16 e 3.17, um par de elétrons em um canal na iteração N é acompanhado pelo sinal $(-1)^N$.

tipo	combinação		tipo	combinação
1:	$j'_1 + \frac{1}{2}, j'_2 + \frac{1}{2}, s' + 0$		9:	$j'_1 + 0, j'_2 + 0, s' + 0$
2:	$j'_1 + \frac{1}{2}, j'_2 + 0, s' + \frac{1}{2}$		10:	$j'_1 + 0, j'_2 + 0, s' - 1$
3:	$j'_1 + \frac{1}{2}, j'_2 + 0, s' - \frac{1}{2}$		11:	$j'_1 + 0, j'_2 - \frac{1}{2}, s' + \frac{1}{2}$
4:	$j'_1 + \frac{1}{2}, j'_2 - \frac{1}{2}, s' + 0$		12:	$j'_1 + 0, j'_2 - \frac{1}{2}, s' - \frac{1}{2}$
5:	$j'_1 + 0, j'_2 + \frac{1}{2}, s' + \frac{1}{2}$		13:	$j'_1 - \frac{1}{2}, j'_2 + \frac{1}{2}, s' + 0$
6:	$j'_1 + 0, j'_2 + \frac{1}{2}, s' - \frac{1}{2}$		14:	$j'_1 - \frac{1}{2}, j'_2 + 0, s' + \frac{1}{2}$
7:	$j'_1 + 0, j'_2 + 0, s' + 1$		15:	$j'_1 - \frac{1}{2}, j'_2 + 0, s' - \frac{1}{2}$
8:	$j'_1 + 0, j'_2 + 0, s' + 0$		16:	$j'_1 - \frac{1}{2}, j'_2 - \frac{1}{2}, s' + 0$

Tabela 3.2: Tipo e combinação. Nesta Tabela j'_1, j'_2 e s' são números quânticos dos auto-estados da iteração $N - 1$.

Da Tabela 3.2 temos que o procedimento *tipo 3* é

$$\begin{aligned} j_1 &= j'_1 + \frac{1}{2} \\ j_2 &= j'_2 + 0 \\ s &= s' - \frac{1}{2}, \end{aligned}$$

onde j'_1 , j'_2 e s' são números quânticos da iteração anterior $N-1$. Devemos então procurar na Tabela 3.1 os estados de canal que tenham o números quântico $1/2$ para o canal 1, 0 para o canal 2 e $1/2$ para o spin total. Combinamos cada um deles com um conveniente estado da iteração $N-1$, usando o Teorema de Wigner-Eckart 3.29 e coeficientes de Clebsh-Gordan [45]. O resultado é a expressão abaixo (nesta expressão j_1 , j_2 e s são números quânticos do estado resultante da iteração N):

$$\begin{aligned} |j_1, j_{1z}, j_2, j_{2z}, s, s_z; 3\rangle_N &= \\ &= -\sqrt{\frac{s-s_z+1}{2s+2}} \left\{ (-1)^N \sqrt{\frac{j_1+j_{1z}}{2j_1}} |j_1 - \frac{1}{2}, j_{1z} - \frac{1}{2}, j_2, j_{2z}, s + \frac{1}{2}, s_z - \frac{1}{2}; \uparrow\downarrow, \uparrow\rangle \right. \\ &\quad \left. + \sqrt{\frac{j_1-j_{1z}}{2j_1}} |j_1 - \frac{1}{2}, j_{1z} + \frac{1}{2}, j_2, j_{2z}, s + \frac{1}{2}, s_z - \frac{1}{2}; 0, \uparrow\rangle \right\} \\ &+ \sqrt{\frac{s+s_z+1}{2s+2}} \left\{ (-1)^N \sqrt{\frac{j_1+j_{1z}}{2j_1}} |j_1 - \frac{1}{2}, j_{1z} - \frac{1}{2}, j_2, j_{2z}, s + \frac{1}{2}, s_z + \frac{1}{2}; \uparrow\downarrow, \downarrow\rangle \right. \\ &\quad \left. + \sqrt{\frac{j_1-j_{1z}}{2j_1}} |j_1 - \frac{1}{2}, j_{1z} + \frac{1}{2}, j_2, j_{2z}, s + \frac{1}{2}, s_z + \frac{1}{2}; 0, \downarrow\rangle \right\} \quad (3.34) \end{aligned}$$

Os vetores da base não dependem de j_{1z} , j_{2z} ou s_z , então não temos necessidade dos estados para todas essas componentes z e basta considerarmos aqueles em que $j_{1z} = j_1$, $j_{2z} = j_2$ e $s_z = s$. No Apêndice A os vetores da base estão escritos dessa forma. Como exemplo, o estado tipo 3 ($|j_1, j_{1z}, j_2, j_{2z}, s, s_z; 3\rangle_N \equiv |3\rangle_N$) fica assim

$$\begin{aligned} |3\rangle_N &= -\sqrt{\frac{1}{2s+2}} (-1)^N |j_1 - 1/2, j_1 - 1/2, j_2, j_2, s + 1/2, s - 1/2; \uparrow\downarrow, \uparrow\rangle \\ &+ \sqrt{\frac{2s+1}{2s+2}} (-1)^N |j_1 - 1/2, j_1 - 1/2, j_2, j_2, s + 1/2, s + 1/2; \uparrow\downarrow, \downarrow\rangle. \quad (3.35) \end{aligned}$$

Resumindo: cada auto-estado da iteração $N-1$ resulta em vetores da base da iteração

N através de 16 procedimentos (*tipos*) diferentes. Usando o Teorema de Wigner-Eckart e os coeficientes de Clebsh-Gordan, os vetores com mesmos números quânticos são agrupados para formar os estados da base da iteração N . Como os vetores da base não dependem de j_{1z} , j_{2z} ou s_z , fazemos $j_{1z} = j_1$, $j_{2z} = j_2$ e $s_z = s$.

O passo seguinte é encontrar os elementos de matriz de H_N .

3.5.2 Os elementos de matriz de H_N

Devemos calcular os elementos de matriz $\langle j'_1, j'_2, s', tipo' | H_N | j_1, j_2, s, tipo \rangle$ usando a transformação definida pelo GRN (Eq. 3.32) que reescrevemos aqui:

$$H_N = \sqrt{\Lambda} H_{N-1} + \xi_{N-1} (f_{N-1, \sigma, \alpha}^\dagger f_{N, \sigma, \alpha} + f_{N, \sigma, \alpha}^\dagger f_{N-1, \sigma, \alpha}) .$$

Salientamos que agora, por economia de notação, tanto j_1 , j_2 e s como j'_1 , j'_2 e s' são números quânticos de estados quaisquer da iteração atual N .

Os elementos diagonais de H_N nada mais são que os autovalores da iteração anterior multiplicados por $\sqrt{\Lambda}$.

Os elementos não diagonais são conectados pelos operadores $f_{N-1, \sigma, \alpha}^\dagger f_{N, \sigma, \alpha}$ ou pelos operadores $f_{N, \sigma, \alpha}^\dagger f_{N-1, \sigma, \alpha}$. A base de operadores $\{f_{n, \sigma, \alpha}^\dagger\}$ cria ou destrói elétrons na respectiva iteração n . Por causa disso os elementos não diagonais somente serão diferentes de zero em um dos dois casos:

- i) $j'_1 = j_1$, $j'_2 = j_2 \pm 1/2$ ou
- ii) $j'_1 = j_1 \pm 1/2$, $j'_2 = j_2$.

Os estados da iteração N são bem determinados pelos procedimentos (*tipos*) que os criaram. Por causa disso, as duas condições acima podem ser explicitadas em combinações possíveis dos *tipos* conforme está mostrado na Tabela 3.3.

Os elementos de matriz não-diagonais $\langle j'_1, j'_2, s', tipo' | H_N | j_1, j_2, s, tipo \rangle$ que não estejam listados na Tabela 3.3 são nulos. Os elementos não-diagonais não nulos são calculados usando o Teorema de Wigner-Eckart e álgebra vetorial.

$2 \rightarrow 1$	$3 \rightarrow 1$	$4 \rightarrow 2, 3$
$5 \rightarrow 1$	$6 \rightarrow 1$	$7 \rightarrow 2, 5$
$8 \rightarrow 2, 3, 5, 6$	$9 \rightarrow 2, 3, 5, 6$	$10 \rightarrow 2, 3, 5, 6$
$11 \rightarrow 4, 7, 8, 9, 10$	$12 \rightarrow 4, 7, 8, 9, 10$	$13 \rightarrow 5, 6$
$14 \rightarrow 7, 8, 9, 10, 13$	$15 \rightarrow 7, 8, 9, 10, 13, 14$	$16 \rightarrow 11, 12, 14, 15$

Tabela 3.3: Estados que combinam entre si. Por exemplo, o estado formado pelo tipo 8 só se combina com os estados formados pelos tipos 2,3,5 e 6.

Devido à complexidade do Hamiltoniano, Eq. 3.1, o cálculo destes elementos de matriz não é uma tarefa fácil. Em outros modelos tratados pelo GRN a maneira de se separar os espaços é simplesmente

$$\langle f_{N-1,\sigma,\alpha}^\dagger f_{N,\sigma,\alpha} \rangle_N \Rightarrow \langle f_{N-1,\sigma,\alpha}^\dagger \rangle_{N-1} \otimes \langle f_{N,\sigma,\alpha} \rangle_N \quad (3.36)$$

onde $\otimes$ simboliza o produto entre os dois espaços vetoriais. Nestes modelos isso causa no máximo uma diferença de fase que em nada contribui para o autovalor [19].

Em nosso modelo esse processo simples não é suficiente pois altera o autovalor. Foi necessário estabelecer um procedimento consistente para tratar com operadores que modificam ou não o número de elétrons. No Apêndice B apresentamos detalhadamente o processo para se calcular os elementos de matriz e listamos todos os 40 elementos de matriz não diagonal que podem resultar em valor não nulo.

Apresentamos aqui, como exemplo, o resultado do elemento de matriz $\langle 12 | H_N | 4 \rangle_N$

$$\langle 12 | H_N | 4 \rangle_N = -(-1)^N \sqrt{\frac{2s+2}{2s+1}} \left\langle j_1, j_2 + \frac{1}{2}, s + \frac{1}{2} \left| f_{N-1,1}^\dagger \right| j_1 - \frac{1}{2}, j_2 + \frac{1}{2}, s \right\rangle_{N-1} \quad (3.37)$$

O elemento de matriz é basicamente formado por um coeficiente multiplicado pelo termo $\left\langle j_1, j_2 + \frac{1}{2}, s + \frac{1}{2} \left| \right| j_1 - \frac{1}{2}, j_2 + \frac{1}{2}, s \right\rangle_{N-1}$. Este termo, pelo fato de não depender da componente z é denominado de invariante.

A seguir mostramos como calcular os invariantes.

<i>a:</i>	$j'_1 = j_1$	$j'_2 = j_2 - 1/2$	$s' = s - 1/2$
<i>b:</i>	$j'_1 = j_1$	$j'_2 = j_2 - 1/2$	$s' = s + 1/2$
<i>c:</i>	$j'_1 = j_1 - 1/2$	$j'_2 = j_2$	$s' = s - 1/2$
<i>d:</i>	$j'_1 = j_1 - 1/2$	$j'_2 = j_2$	$s' = s + 1/2$

Tabela 3.4: 4 combinações possíveis para os invariantes.

3.5.3 Invariantes

Como podemos observar na Eq. 3.37, o elemento de matriz da iteração N depende de um termo denominado invariante que tem a forma genérica $\langle j_1, j_2, s | | j'_1, j'_2, s' \rangle_{N-1}$. Também por economia de notação, tanto j_1, j_2 e s como j'_1, j'_2 e s' são números quânticos quaisquer na iteração $N - 1$. Observamos que o vetor bra ou vetor ket do invariante não representa apenas um estado, mas sim representa um *sub-espço* da interação $N - 1$: $| | j'_1, j'_2, s' \rangle_{N-1}$ representa o sub-espço j'_1, j'_2, s' ou seja, o conjunto de todos os auto-estados da iteração $N - 1$ que possuem estes números quânticos. Quando quisermos nos referir a um desses estados especificamente, usamos a notação $| | j'_1, j'_2, s', l \rangle$ (l -ésimo auto-estado do sub-espço j'_1, j'_2, s').

Cada auto-estado é combinação de vários vetores da base de H_{N-1} , por isso o termo $\langle | | \rangle_{N-1}$ da Eq. 3.37 representa na verdade os vários invariantes entre esses vetores, que podemos representar pela expressão

$$\langle j_1, j_2, s, r, t | | j'_1, j'_2, s', r', t' \rangle_{N-1} , \quad (3.38)$$

onde r é um índice de contagem e t representa o tipo com o qual o vetor foi construído ($t = 1, 2, \dots, 16$).

Devido à álgebra vetorial, os invariantes só podem ser não nulos quando j_1, j_2, s se combinam com j'_1, j'_2, s' em uma entre quatro maneiras possíveis . Na Tabela 3.4 apresentamos estes quatro modos (*a*, *b*, *c* e *d*). O cálculo dos invariantes entre estados é feito basicamente utilizando o Teorema de Wigner-Eckart e coeficientes de Clebsh-Gordan. Em cada canal existem 20 invariantes possíveis. No Apêndice C detalhamos o procedimento

para se calcular invariantes e listamos todos os 40 invariantes de estado do modelo.

Para tornar o cálculo numérico mais eficiente, em cada iteração se calcula os invariantes que serão usados na iteração seguinte. Assim, logo após a diagonalização do Hamiltoniano H_{N-1} estes invariantes de estados são determinados para serem usados na iteração seguinte H_N . Por exemplo, o invariante formado pelos estados *tipo* 9 e 15 é

$$\left\langle j_1 + \frac{1}{2}, j_2, s + \frac{1}{2}, r', 9 \parallel \parallel j_1, j_2, s, r, 15 \right\rangle = \sqrt{\frac{1}{2}} \sqrt{\frac{2s+3}{2s+2}} \sqrt{\frac{2j_1+1}{2j_1+2}}. \quad (3.39)$$

Para iniciar o processo iterativo é necessário fornecer os auto-estados, os autovalores e os invariantes da iteração inicial $N = -1$. Na próxima seção construiremos a matriz do Hamiltoniano H_{-1} e mostraremos como ela gera a matriz de H_0 iterativamente.

3.5.4 Iteração $N = -1$

A iteração $N = -1$ é definida pelo Hamiltoniano $H_{N=-1}$,

$$H_{-1} = \Lambda^{-1} \left\{ E_0 \sum_{\sigma} |m, \sigma\rangle \langle m, \sigma| + E_{ex} \sum_{\alpha} (|m-1, \alpha\rangle \langle m-1, \alpha| + |m+1, \alpha\rangle \langle m+1, \alpha|) \right\} \quad (3.40)$$

cuja diagonalização resulta no dubleto de spin com energia $\Lambda^{-1}E_0$ e auto-estados (notação $|j_1, j_{1z}; j_2, j_{2z}; s, s_z\rangle$)

$$|m, \downarrow\rangle \equiv |0, 0; 0, 0; 1/2, -1/2\rangle \quad (3.41)$$

$$|m, \uparrow\rangle \equiv |0, 0; 0, 0; 1/2, 1/2\rangle, \quad (3.42)$$

e dois dubletos de canais degenerados com energia $\Lambda^{-1}E_{ex}$:

$$|m-1, 2\rangle \equiv |1/2, -1/2; 0, 0; 0, 0\rangle \quad (3.43)$$

$$-|m+1, 1\rangle \equiv |1/2, 1/2; 0, 0; 0, 0\rangle \quad (3.44)$$

e

$$|m-1, 1\rangle \equiv |0, 0; 1/2, -1/2; 0, 0\rangle \quad (3.45)$$

$$-|m+1, 2\rangle \equiv |0, 0; 1/2, 1/2; 0, 0\rangle . \quad (3.46)$$

A notação à direita do símbolo $\equiv$ é definida pela aplicação dos operadores J_i^2 , J_{iz} , J_1^- e J_2^+ nos auto-estados da esquerda de $\equiv$. Por exemplo, das Eq. 3.16 e 3.17 verifica-se que $J_{1+}|m-1, 1\rangle = -|m+1, 2\rangle$ e $J_{2+}|m-1, 2\rangle = -|m+1, 1\rangle$.

Para realizar o procedimento iterativo é necessário calcular os invariantes que serão usados na próxima iteração ($N = 0$). Na iteração $N = -1$ só existem dois invariantes: $\langle \frac{1}{2}, 0, 0 || 0, 0, 1/2 \rangle$ e $\langle 0, \frac{1}{2}, 0 || 0, 0, 1/2 \rangle$. Eles são calculados como demonstrado no Apêndice C, isto é, usando o Teorema de Wigner-Eckart 3.29 e escolhendo um elemento de matriz conveniente da matriz de H_{-1} :

$$\begin{aligned} & \langle \frac{1}{2}, \frac{1}{2}; 0, 0; 0, 0 | f_{-1, \uparrow, 1}^\dagger | 0, 0; 0, 0; \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \rangle = \\ & \langle 0, 0; 1/2, 1/2 | 1/2, 1/2 \rangle \langle 1/2, -1/2; 1/2, 1/2 | 0, 0 \rangle \langle 1/2, 0, 0 || 0, 0, 1/2 \rangle \\ & = 1(-1/\sqrt{2}) \langle 1/2, 0, 0 || 0, 0, 1/2 \rangle , \end{aligned} \quad (3.47)$$

calculando o elemento de matriz diretamente

$$\langle \frac{1}{2}, \frac{1}{2}; 0, 0; 0, 0 | f_{-1, \uparrow, 1}^\dagger | 0, 0; 0, 0; \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \rangle = -\langle m+1, 1 | f_{-1, \uparrow, 1}^\dagger | m \downarrow \rangle = -1 , \quad (3.48)$$

Portanto,

$$\langle 1/2, 0, 0 || 0, 0, 1/2 \rangle = \sqrt{2} . \quad (3.49)$$

Analogamente,

$$\langle 0, 1/2, 0 || 0, 0, 1/2 \rangle = \sqrt{2} . \quad (3.50)$$

O próximo passo do processo iterativo é determinar a matriz de H_0 .

$N = -1$	filhos - $N = 0$	$N = -1$	filhos - $N = 0$	$N = -1$	filhos - $N = 0$
$ 0, 0, \frac{1}{2}, 1\rangle$	$ \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 1\rangle_1$	$ 0, \frac{1}{2}, 0, 1\rangle$	$ \frac{1}{2}, 1, 0, 1\rangle_1$	$ \frac{1}{2}, 0, 0, 1\rangle$	$ 1, \frac{1}{2}, 0, 1\rangle_1$
	$ \frac{1}{2}, 0, 1, 1\rangle_2$		$ \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 2\rangle_2$		$ 1, 0, \frac{1}{2}, 1\rangle_2$
	$ \frac{1}{2}, 0, 0, 1\rangle_3$		$ \frac{1}{2}, 0, 0, 2\rangle_4$		$ \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 3\rangle_5$
	$ 0, \frac{1}{2}, 1, 1\rangle_5$		$ 0, 1, \frac{1}{2}, 1\rangle_5$		$ \frac{1}{2}, 0, 1, 2\rangle_7$
	$ 0, \frac{1}{2}, 0, 1\rangle_6$		$ 0, \frac{1}{2}, 1, 2\rangle_7$		$ \frac{1}{2}, 0, 0, 3\rangle_8$
	$ 0, 0, \frac{3}{2}, 1\rangle_7$		$ 0, \frac{1}{2}, 0, 2\rangle_8$		$ 0, \frac{1}{2}, 0, 3\rangle_{13}$
	$ 0, 0, \frac{1}{2}, 1\rangle_8$		$ 0, 0, \frac{1}{2}, 3\rangle_{11}$		$ 0, 0, \frac{1}{2}, 4\rangle_{14}$
	$ 0, 0, \frac{1}{2}, 2\rangle_9$				

Tabela 3.5: Auto-estados da iteração $N = -1$ e correspondentes vetores da base de $N = 0$ (filhos), criados a partir dele segundo a Tabela 3.2. Usamos a notação $|j_1, j_2, s, r\rangle_{tipo}$, onde r é o índice de contagem dos vetores que têm o mesmo número quântico e *tipo* indica qual o procedimento que resultou neste vetor.

Tamanho					
4 * 4	$ 00\frac{1}{2}\rangle$				
3 * 3	$ 0\frac{1}{2}0\rangle, 0\frac{1}{2}1\rangle$	$ \frac{1}{2}00\rangle, \frac{1}{2}01\rangle$	$ \frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2}\rangle$		
2 * 2	$ 10\frac{1}{2}\rangle, 11\frac{1}{2}\rangle$	$ 00\frac{3}{2}\rangle, 01\frac{1}{2}\rangle$	$ 1\frac{1}{2}0\rangle, 1\frac{1}{2}1\rangle$		
1 * 1	$ 00\frac{1}{2}\rangle$	$ 01\frac{1}{2}\rangle$	$ 1\frac{1}{2}0\rangle$	$ 1\frac{1}{2}1\rangle$	$ 2\frac{1}{2}0\rangle$

Tabela 3.6: Na iteração $N - 1$ temos um sub-espaco com tamanho 4×4 , três com tamanho 3×3 , dois com tamanho 2×2 e cinco sub-espacos com tamanho 1×1 .

3.5.5 Iteração $N = 0$

De acordo com a transformação do GRN (Eq. 3.32) o Hamiltoniano H_0 é

$$H_0 = \sqrt{\Lambda} H_{-1} + \sum_{\sigma, \alpha} \xi_{-1}^z(\alpha) (f_{-1, \sigma, \alpha}^\dagger f_{0, \sigma, \alpha} + h.c.) . \quad (3.51)$$

Os vetores da base da iteração $N = 0$ são gerados dos auto-estados da iteração $N = -1$ (Eq. 3.41 ... 3.46) de acordo com a Tabela 3.2. Na Tabela 3.5 apresentamos os auto-estados de $N = -1$ e os respectivos estados da base de $N = 0$ originados a partir dele (filhos).

Agrupamos os vetores da base de acordo com os números quânticos e assim temos os sub-espacos da iteração $N = 0$, como mostrado na Tabela 3.6.

O cálculo dos elementos de matriz de cada sub-espaco segue o procedimento já delineado neste capítulo. Como exemplo vamos calcular o maior sub-espaco (sub-espaco 4×4)

da iteração $N = 0$.

Sub-espço $|0 \ 0 \ 1/2\rangle$:

A menos de um fator constante $\Lambda^{-1/2}$, os elementos diagonais deste sub-espço são $H_{11} = H_{22} = E_0$ e $H_{33} = H_{44} = E_{ex}$. Os elementos não-diagonais são (notação: $\langle type|H_0|type'\rangle$):

$$\begin{aligned}
H_{43} &= \langle 14|H_0|11\rangle = 0 \\
H_{41} &= \langle 14|H_0|8\rangle = \sqrt{2}V_1\sqrt{\frac{1}{4}}\sqrt{2}\langle 1/2, 0, 0||1||0, 0, 1/2\rangle = \sqrt{2}V_1\frac{1}{2}\sqrt{2}\sqrt{2} = \sqrt{2}V_1 \\
H_{42} &= \langle 14|H_0|9\rangle = -\sqrt{2}V_1\sqrt{\frac{3}{4}}\sqrt{2}\langle 1/2, 0, 0||2||0, 0, 1/2\rangle = -\sqrt{2}V_1\sqrt{\frac{3}{4}}\sqrt{2}\sqrt{2} = -\sqrt{12}V_1 \\
H_{31} &= \langle 11|H_0|8\rangle = \sqrt{2}V_2\sqrt{\frac{1}{4}}\sqrt{2}\langle 0, 1/2, 0||2||0, 0, 1/2\rangle = \sqrt{2}V_2\sqrt{\frac{1}{4}}\sqrt{2}\sqrt{2} = \sqrt{2}V_2 \\
H_{32} &= \langle 11|H_0|9\rangle = \sqrt{2}V_2\sqrt{\frac{3}{4}}\sqrt{2}\langle 0, 1/2, 0||2||0, 0, 1/2\rangle = \sqrt{2}V_2\sqrt{\frac{3}{4}}\sqrt{2}\sqrt{2} = \sqrt{12}V_2 \\
H_{21} &= \langle 9|H_0|8\rangle = 0
\end{aligned}$$

Portanto,

$$H_0 = \Lambda^{-1/2} \begin{pmatrix} E_0 & 0 & \sqrt{2}V_2 & \sqrt{2}V_1 \\ 0 & E_0 & \sqrt{12}V_2 & -\sqrt{12}V_1 \\ \sqrt{2}V_2 & \sqrt{12}V_2 & E_{ex} & 0 \\ \sqrt{2}V_1 & -\sqrt{12}V_1 & 0 & E_{ex} \end{pmatrix}$$

O fator $\Lambda^{-1/2}$ aparece devido à transformação do GRN: a energia na diagonal é $\sqrt{\Lambda}$ vezes a energia da iteração anterior, que são $\Lambda^{-1}E_0$ ou $\Lambda^{-1}E_{ex}$. As energias não-diagonais são proporcionais a $\xi_{-1}^z(\alpha) = \Lambda^{-1/2}\sqrt{2}V_\alpha$ (Eq. 3.32).

Os autovalores desse sub-espço de H_0 são, então, obtidos da equação secular

$$(E_{ex} - \lambda)\{(E_0 - \lambda)^2(E_{ex} - \lambda) - 8(V_1^2 + V_2^2)(E_0 - \lambda)\} + 48V_1^2V_2^2 = 0, \quad (3.52)$$

Os auto-valores medidos em relação a E_0 são

$$\lambda_{\pm,\pm} = \frac{\Delta}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{\Delta}{2}\right)^2 + 4(V_1^2 + V_2^2) \pm 4\sqrt{V_1^4 + V_2^4 - V_1^2 V_2^2}}, \quad (3.53)$$

onde $\Delta \equiv E_{ex} - E_0$.

Esses autovalores e os respectivos autovetores são usados para se construir a base de $N = 1$. Ao mesmo tempo, eles já são usados para se calcular os valores da suscetibilidade e do calor específico.

3.6 Equivalência com o Modelo de Kondo de dois canais

Já mostramos a equivalência do HDC com o Modelo de Kondo. Vamos aproveitar a natureza simples de H_0 para mostrar que as excitações de mais baixa energia do Hamiltoniano H_0 de fato correspondem aquelas do Modelo de Kondo de dois canais. Primeiro expandimos todos os autovalores de H_0 até ordem V_α^2/Δ . Em seguida subtraímos o estado fundamental de H_0 e mantemos apenas as energias até a ordem V_α^2/Δ . Com isso obtemos $\lambda_- = 0$ e $\lambda_+ = 8F/\Delta$, onde

$$F = \sqrt{V_1^4 + V_2^4 - 2V_1^2 V_2^2}. \quad (3.54)$$

Na Tabela 3.7 apresentamos os valores das excitações mais baixas de H_0 .

Agora vamos encontrar as energias do Hamiltoniano de Kondo de dois canais

$$H_K = (J_1 \vec{s}_1 + J_2 \vec{s}_2) \cdot \vec{S}, \quad (3.55)$$

onde J_α é a energia de exchange, $\vec{S}$ é o spin local e $\vec{s}_\alpha$ é a densidade de spin dos elétrons de condução do canal α . Reescrevemos o produto escalar $\vec{s} \cdot \vec{S}$ como $s_z S_z + 1/2(s_+ S_- + s_- S_+)$ em cada canal. Vamos manter somente os vetores da base que contêm um spin no nível

$ state\rangle$	H_0	$H_0 - (ground - state)$
$ \frac{1}{2}00\rangle$	$-2\frac{V_1^2+4V_2^2}{\Delta}$	$2\frac{V_1^2-2V_2^2+2F}{\Delta}$
$ 0\frac{1}{2}0\rangle$	$-2\frac{4V_1^2+V_2^2}{\Delta}$	$2\frac{-2V_1^2+V_2^2+2F}{\Delta}$
$ 00\frac{1}{2}\rangle$	$-4\frac{V_1^2+V_2^2+F}{\Delta}$	0
$ 00\frac{1}{2}\rangle$	$-4\frac{V_1^2+V_2^2-F}{\Delta}$	$8\frac{F}{\Delta}$
$ 0\frac{1}{2}1\rangle$	$-2\frac{V_2^2}{\Delta}$	$2\frac{2V_1^2+V_2^2+F}{\Delta}$
$ \frac{1}{2}01\rangle$	$-2\frac{V_1^2}{\Delta}$	$2\frac{V_1^2+2V_2^2+2F}{\Delta}$
$ \frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2}\rangle$	$-2\frac{V_1^2+V_2^2}{\Delta}$	$2\frac{V_1^2+V_2^2+2F}{\Delta}$
$ 00\frac{3}{2}\rangle$	0	$4\frac{V_1^2+V_2^2+F}{\Delta}$

Tabela 3.7: Níveis de energia de H_0 até ordem V^2/Δ onde $F = \sqrt{V_1^4 + V_2^4 - 2V_1^2V_2^2}$.

local que é $|m\sigma\rangle$, por exemplo, o subspaço $|001/2\rangle$. Os vetores da base de interesse são

$$\begin{aligned}
|1\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|m, \uparrow\rangle(|\uparrow, \downarrow\rangle - |\downarrow, \uparrow\rangle)) \\
|2\rangle &= -\sqrt{\frac{2}{3}}|m, \downarrow\rangle|\uparrow, \uparrow\rangle + \frac{1}{\sqrt{6}}|m, \uparrow\rangle(|\uparrow, \downarrow\rangle + |\downarrow, \uparrow\rangle),
\end{aligned}$$

resultando em

$$\begin{aligned}
\langle 1|H_K|1\rangle &= 0 \\
\langle 2|H_K|2\rangle &= -\frac{1}{2}(J_1 + J_2) \\
\langle 2|H_K|1\rangle &= \frac{\sqrt{3}}{4}(J_1 - J_2).
\end{aligned} \tag{3.56}$$

Os autovalores H_K são, então,

$$\lambda_{\pm} = -\frac{J_1 + J_2}{4} \pm \frac{1}{2}\sqrt{J_1^2 + J_2^2 - J_1J_2}. \tag{3.57}$$

O estado fundamentele é $\lambda_- = -\frac{J_1+J_2}{4} - \frac{1}{2}\sqrt{J_1^2 + J_2^2 - J_1J_2}$. Medindo $\lambda_{\pm}$ a partir dele e usando a relação

$$J_{\alpha} = 8\frac{V_{\alpha}^2}{\Delta} \tag{3.58}$$

obtida pela Transformação de Schrieffer-Wolff, nós reproduzimos os autovalores de H_0 no

sub-espço $|001/2\rangle$:

$$\begin{aligned}\lambda_- &= 0 \\ \lambda_+ &= 8\frac{F}{\Delta}.\end{aligned}\tag{3.59}$$

Assim, temos o Hamiltoniano de dois canais diagonalizado e, portanto, conhecemos os níveis de energia em cada iteração.

Apesar do objetivo ser o cálculo da suscetibilidade magnética e do calor específico, os níveis de energia já permitem uma análise preliminar da física do modelo de dois canais. Em vista disso, comentaremos um pouco sobre pontos fixos na próxima seção.

3.7 GRN e pontos fixos

O efeito prático do Grupo de Renormalização Numérico é fazer um mapeamento $\mathfrak{S}$ do Hamiltoniano $H(\wp)$, onde $\wp$ é o conjunto dos parâmetros de interação ou $(\wp = \wp_1, \wp_2, \dots)$, em outro Hamiltoniano que tem a mesma forma de H mas com outro conjunto de parâmetros $(\wp' = \wp'_1, \wp'_2, \dots)$ [30]. Escrevendo isso formalmente

$$\mathfrak{S}\{H(\wp)\} = H(\wp') \Rightarrow \mathfrak{S}(\wp) = \wp'.\tag{3.60}$$

Esse processo é feito eliminando estados de altas energias, sendo que o Hamiltoniano efetivo passa a ser válido em uma escala de energia menor. Aplicando a transformação $\mathfrak{S}$ várias vezes podemos acompanhar a *trajetória* do conjunto de parâmetros $\wp$ no espaço de fase. Quando a trajetória passa a ficar restrita em uma pequena região do espaço de fase dizemos que a transformação $\mathfrak{S}$ atingiu um *ponto fixo*, isto é, o conjunto de parâmetros $\wp^*$ passa a ser invariante sob transformação ($\mathfrak{S}(\wp^*) = \wp^*$). As trajetórias geradas por repetidas aplicações do Grupo de Renormalização podem ser atraídas ou repelidas pelos pontos fixos. Podemos compreender isso linearizando $\mathfrak{S}$ numa região bem próxima a um

ponto fixo qualquer (em geral a transformação $\mathfrak{S}$ não é linear),

$$\mathfrak{S}(\varphi = \varphi^* + \delta\varphi) = \varphi^* + \mathfrak{N}(\delta\varphi) + O(\delta\varphi^2). \quad (3.61)$$

onde $\mathfrak{N}$ é uma transformação linear. Suponhamos que N_n e λ_n sejam respectivamente os autovetores e os autovalores de $\mathfrak{N}$, e que N_n forma uma base completa. Expandindo $\delta\varphi$ nesta base ($\delta\varphi = \sum_n \delta P_n N_n$, onde δP_n são os coeficientes) e aplicando m vezes a transformação $\mathfrak{S}$, obtemos

$$\mathfrak{S}^m(\varphi = \varphi^* + \delta\varphi) = \varphi^* + \sum_n \delta P_n (\lambda_n)^m N_n + O(\delta\varphi^2). \quad (3.62)$$

Se o autovalor λ_n for maior que um ($\lambda_n > 1$), à medida que m aumenta $\delta\varphi$ cresce, distanciando φ do ponto fixo φ^* . Nesse caso o operador correspondente ao autovalor λ_n é denominado de operador *relevante*. Se $\lambda_n < 1$, $\delta\varphi$ diminui à medida que m aumenta, aproximando φ do ponto fixo φ^* . Nesse caso o operador correspondente é denominado de operador *irrelevante*. Um ponto fixo é denominado de *instável* quando a linearização em sua vizinhança gera pelo menos um operador relevante (no gráfico do espaço de fase pelo menos algumas trajetórias tendem a se afastar do ponto fixo). Por sua vez ele é denominado de *estável* quando a linearização gera apenas operadores irrelevantes (se observa no espaço de fase todas as trajetórias se aproximando do ponto fixo - Fig.3.3). Quando $\lambda_n = 1$ o operador correspondente é denominado de *marginal*. O ponto fixo cuja linearização não gera nenhum operador relevante e pelo menos um marginal, é conhecido como ponto fixo *marginal*.

Dessa forma, apenas acompanhando o comportamento dos níveis de energia já se percebe a existência de pontos fixos. Essa análise está feita no Cap. 4.

Na próxima seção vamos mostrar o procedimento para o cálculo da Suscetibilidade Magnética e do Calor Específico.

Figura 3.3: Pontos fixos e trajetórias no espaço de fase. Em a) temos um ponto fixo estável. Em b) temos um ponto fixo que é estável em uma direção (linha reta), mas instável nas outras o que significa que ele tem pelo menos um operador relevante.

3.8 Cálculo da suscetibilidade magnética e do calor específico

Conforme já é padrão na utilização do GRN [22], a suscetibilidade magnética é calculada da seguinte forma

$$\frac{K_B T \chi_{imp}(T)}{(g\mu_B)^2} = [\langle S_Z^2 \rangle - \langle S_Z \rangle^2] \quad (3.63)$$

e o calor específico

$$\frac{C(T)}{K_B} = \beta^2 [\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2], \quad (3.64)$$

onde as energias E são obtidas da diagonalização do Hamiltoniano de dois canais, μ_B é o magneton de Bohr, g é o fator giromagnético e K_B é constante de Boltzmann. Como mencionamos na seção 3.3, para recuperarmos o Hamiltoniano original basta fazermos o limite,

$$H = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{D(1 + \Lambda^{-1})}{2} \Lambda^{-N-1} H_N \quad (3.65)$$

Portanto, para recuperarmos a escala de energia original em uma da iteração N basta

Figura 3.4: Esquema do procedimento intercalado mostrando, como exemplo, uma banda discretizada com $\Lambda = 4$ e $z = 1.0$ (em cima), outra com $\Lambda = 4$ e $z = 0.5$ (no meio) e outra com $\Lambda = 2$ e $z = 1.0$ (em baixo). Podemos ver que intercalando a banda de cima com a banda do meio teremos a banda com $\Lambda = 2$ e $z = 1.0$.

fazemos

$$\exp(\beta H) = \exp\left(\beta \frac{1 + \Lambda^{-1}}{2} D \Lambda^{-N-1} H_N\right) \equiv \exp(\bar{\beta} H) \quad (3.66)$$

onde definimos

$$\bar{\beta} = \beta \frac{1 + \Lambda^{-1}}{2} D \Lambda^{-N-1} \quad (3.67)$$

e podemos assim identificar cada iteração com uma respectiva escala de temperatura (à medida que N aumenta a temperatura diminui).

A diagonalização do Hamiltoniano pelo Grupo de Renormalização Numérico (GRN) se baseia na discretização logarítmica da banda de condução. Isso introduz oscilações espúrias em $T_{\chi_{imp}}(T)$ e $C(T)$ que se evidenciam à medida que se usa valores de Λ muito maiores que 1. Esse problema é solucionado pelo procedimento que denominamos intercalado [22], como é mostrado na Fig. 3.4.

A inclusão do parâmetro z permitiu executar o procedimento do GRN para valores de Λ maiores que os usuais, viabilizando em alguns casos o cálculo do calor específico pela diminuição no tamanho de memória computacional necessária. Com z a discretização da banda fica $\Lambda^{-(n+z+1)}D \leq |\epsilon| \leq \Lambda^{-(n+z)}D$. Na Fig. 3.4 mostramos o procedimento

Figura 3.5: Duas curvas de calor específico com os mesmos parâmetros $V_1 = 0.005$, $V_2 = 0.01$ e $\Delta = E_{ex} - E_0 = 0.002$, mas em um deles foi feito o procedimento intercalado. Podemos observar que as oscilações são sensivelmente reduzidas com este processo.

conhecido como intercalado, que faz com que se obtenha o mesmo resultado de discretizar a banda de condução com $\Lambda = 2$ com $z = 1.0$ fazendo uma média com as discretizações $\Lambda = 4$ com $z = 1.0$ e $\Lambda = 4$ com $z = 0.5$. Como exemplo, na Fig. 3.5 mostramos o efeito que o procedimento intercalado faz nas curvas de calor específico, retirando quase completamente as oscilações espúrias. Na suscetibilidade magnética o efeito é, inclusive, mais eficaz.

Na próxima seção nós apresentamos a implementação computacional da técnica do GRN no Hamiltoniano de Anderson de dois canais.

3.9 Implementação computacional

Desenvolvemos um programa em linguagem C++ baseado na filosofia de Programação Orientada para Objetos (POO) [46, 47]. Para isso primeiramente identificamos objetos e construímos classes que caracterizam o comportamento de todos os dados básicos do sistema. A principal vantagem do uso da linguagem C++ é o controle que ela permite na utilização e liberação de memória, essencial em programas que manipulam grande quantidade de dados (o número de estados, e consequentemente, o tamanho da matriz

Figura 3.6: Algoritmo do processo iterativo do GRN. No final da iteração $N - 1$, H_{N-1} já está completamente diagonalizado, portanto são conhecidos seus auto-estados e seus autovalores. Cada auto-estado vai gerar vários estados de base na iteração seguinte (N), com novos números quânticos de acordo com os procedimentos delineados na Tabela 3.2. Estes novos vetores são agrupados de acordo com os números quânticos formando sub-espacos. Encontrados os elementos de matriz, os sub-espacos são diagonalizados resultando nos autovalores e autovetores de H_N .

Hamiltoniana, cresce na proporção de 16^N). Outra vantagem é o fato do código ser facilmente reaproveitável. Para desenvolvimento do programa utilizamos um microcomputador Pentium II 233MHz com 128 Mbytes de RAM. Com o programa desenvolvido obtemos resultados utilizando estações de trabalho do IFSC/USP: estação de trabalho Digital Corporation (1996) com processador de 400Mhz alpha 21140, 512 Mbytes memória, 20 GB de disco e uma estação de trabalho Sun Microsystems (1997) com processador UltraSparc de 250Mhz, 2 Gbytes de memória e 40 Gbytes de disco.

Na Fig. 3.6 apresentamos o processo iterativo do GRN. Após diagonalizado uma iteração, por exemplo, iteração H_{N-1} , seus auto-estados e autovalores são usados para construir os vetores da base da iteração seguinte, como já explicamos no Cap. 3.

A partir dos auto-estados da iteração anterior nós construímos a base dos subespacos que formam o Hamiltoniano da iteração seguinte. Cada subespaço é identificado pelos números quânticos j_1 , j_2 e s . Um elemento particular de um subespaço é identificado pelos três números quânticos mais um índice de contagem. Com a base calcula-se os elementos

de matriz, utilizando-se os elementos invariantes já calculados na iteração anterior. Os subespaços são então diagonalizados e os invariantes que serão usados na iteração seguinte já são encontrados. Com os autovalores dos subespaços calcula-se as propriedades termodinâmicas desejadas. O número de iterações (N) é arbitrário. Ele está relacionado com a temperatura que desejamos alcançar. A técnica do GRN permite alcançar temperaturas tão baixas quanto se queira.

A Fig. 3.6 mostra que o algoritmo é simples. Mas sua implementação computacional apresenta dificuldades. Devido ao grande número de graus de liberdade, é essencial o uso de procedimentos que minimizem a memória e o tempo de processamento. Por exemplo, não se sabe a priori qual o tamanho que terá um determinado sub-espaço na iteração H_N . Logo, o uso de alocação estática ou acarretaria um desperdício de espaço livre tornando inviável a programação por falta de memória, ou acarretaria uma interrupção indesejável quando o espaço estipulado não fosse suficiente para armazenar todos os elementos do sub-espaço. Outro detalhe a ser considerado é o tempo de execução. Como muitos processos diferentes são usados com os mesmos dados, é desejável, sempre que possível, aglutinar estes procedimentos nos mesmos laços. Por exemplo, após a diagonalização de cada sub-espaço seus autovalores e seus autovetores são usados para o cálculo dos invariantes que serão usados na iteração seguinte.

No código computacional que desenvolvemos, um dos *objetos* principais é aquele definido pela classe *indices.cpp*. Vamos usá-la como exemplo para descrever brevemente o programa. Usando vetores unidimensionais, vetores bidimensionais e pilhas, ela guarda os valores importantes para a manipulação de cada subespaço e de seus elementos. Estes valores são o tamanho do sub-espaço, índices geradores dos elementos, *tipo* de procedimento dos elementos, autovalores, autovetores, etc. Como é da própria definição da linguagem C++ e da Programação Orientada a Objeto (POO), esta classe contém grupos de instruções (funções) que manipulam estes valores de forma que cada sub-espaço é manipulado de maneira independente dos outros sub-espaços. A classe *indices.cpp* não contém nenhuma referência aos números quânticos, nem a quantos eles são (em nosso

caso são j_1 , j_2 e s mas a classe *indices.cpp* funcionaria da mesma maneira se houvessem mais ou menos números quânticos). É esta característica que a torna fácil de ser utilizada em outros problemas: a classe *indices.cpp* pode ser usada em outros programas que resolvam Hamiltonianos com qualquer quantidade de números quânticos. Outras classes importantes (*invariantes.cpp*, etc) foram desenvolvidas na mesma filosofia. Somente o programa principal e algumas funções descrevem especificamente o problema que tratamos. Com exceção da função *givens.cc*, todas as demais funções e classes do programa foram feitas por nós (as classes *listao.cpp* e *rtypeeval.cpp* foram adaptadas da referência [46]).

O programa tem onze parâmetros de entrada: quatro parâmetros se referem ao modelo (E_0 , E_{ex} , V_1 e V_2), três se referem a discretização logarítmica (N , Λ e z) e quatro se referem ao controle de memória do programa ($Corte$, $N2$, $CorteN2$ e $nval$). Os últimos quatro serão esclarecidos aqui enquanto os demais já foram mencionados nos capítulos anteriores. O tamanho dos sub-espacos é reduzido devido ao uso das leis de conservação e alocação dinâmica de memória. Ainda assim é inviável calcular todos os estados de H_N para N grande. Assim calculamos os estados até um valor máximo de energia arbitrado, que denominamos de *Corte*. Esse valor é tal que não comprometa a precisão as curvas de calor específico e suscetibilidade. Observou-se que nas iterações iniciais o valor para o *Corte* poderia ser bem menor do que para as iterações seguintes. Por isso criamos os parâmetros $N2$ e $CorteN2$ que simplesmente significam que nas primeiras $N2$ iterações o valor do corte em energia é $CorteN2$. O parâmetro *nval* é um valor arbitrário que limita o tamanho dos sub-espacos.

Como foi explicado no Cap. 3, para retirar as oscilações espúrias originárias da discretização logarítmica é necessário realizar o procedimento intercalado de várias curvas de suscetibilidade ou de calor específico com diferentes valores de z [22]. A situação mais crítica ocorre na curva de calor específico do caso isotrópico ($V_1 = V_2$) quando a degenerescência é muito grande. Nessa situação é necessário fazer a média com oito valores diferentes de z . A Tabela 3.8 apresenta conjunto de parâmetros para obtenção de uma

E_0	E_{xc}	V_1	V_2	Λ	z	N	$Corte$	$N2$	$CorteN2$	$nval$
-0.001	0.001	0.01	0.01	6	0.5	24	45.0	10	25.0	160
-0.001	0.001	0.01	0.01	6	0.625	24	45.0	10	25.0	160
-0.001	0.001	0.01	0.01	6	0.75	24	40.0	10	20.0	160
-0.001	0.001	0.01	0.01	6	0.875	24	40.0	10	20.0	160
-0.001	0.001	0.01	0.01	6	1.0	24	40.0	10	20.0	160
-0.001	0.001	0.01	0.01	6	1.125	24	40.0	10	20.0	160
-0.001	0.001	0.01	0.01	6	1.25	24	40.0	10	20.0	160
-0.001	0.001	0.01	0.01	6	1.375	24	40.0	10	20.0	160

Tabela 3.8: Oito conjuntos de parâmetros para realização do procedimento intercalado para obtenção de calor específico no caso isotrópico.

curva de calor específico no caso isotrópico. Devido à versatilidade do programa ele pode ser executado em várias máquinas diferentes. Assim reduz-se o tempo total para obter os oito conjuntos de parâmetros. Em média esse tempo é de cerca de um mês. Para os conjuntos de parâmetros com z menor, o programa pode atingir 1,8 *Mbytes* de memória. A obtenção de curvas de suscetibilidade magnética é bem mais fácil.

Fizemos testes de desempenho comparando com um programa desenvolvido em linguagem FORTRAN 90. Estes testes usaram parâmetros de entrada específicos devido ao fato do programa em FORTRAN 90 ser capaz de manipular diretamente pouca quantidade de memória, ao contrário do programa em C++. Os testes foram suficientes para mostrar a equivalência dos resultados numéricos.

Capítulo 4

Resultados

Neste capítulo vamos mostrar os resultados obtidos através do Grupo de Renormalização Numérico para o Modelo de Anderson de dois canais.

4.1 Pontos fixos do Hamiltoniano de Anderson de dois canais

Para apresentar os pontos fixos do Hamiltoniano de Anderson de dois canais vamos mencionar os pontos fixos do Hamiltoniano de Anderson de um canal. Na seção 3.7 descrevemos os conceitos de ponto de fixo, operadores relevantes, etc. No Cap. 2 apresentamos os três regimes característicos do Modelo de Anderson tradicional, que correspondem aos pontos fixos fortemente acoplado (regime Kondo), momento local (estado fundamental da impureza com spin $1/2$) e impureza livre (não há acoplamento entre a impureza e os elétrons de condução do metal). Os dois primeiros pontos fixos são também característicos do Modelo de Kondo.

Como discutido no Capítulo 2, o ponto fixo de impureza livre do Hamiltoniano de Kondo, isto é, com $J = 0$, corresponde ao de momento local no Modelo de Anderson. Esse ponto fixo é instável já que qualquer valor finito de J leva o sistema em baixas temperaturas a se acoplar fortemente com a banda de condução, ou seja, o sistema é

levado a um ponto fixo de acoplamento forte que é estável [15].

No Hamiltoniano de Anderson de um canal, o ponto fixo de momento local só ocorre se considerarmos a interação Coulombiana U igual a infinito, que faz com que os estados magnéticos sejam equivalentes ao estado fundamental de valência fixa do Modelo de Kondo. Se considerarmos $U = 0$ isso não ocorre e nesse caso observa-se a existência do terceiro ponto fixo denominado de impureza livre [19].

Nos modelos de dois canais aparece um quarto tipo de ponto fixo. Nozières e Blandin [9] mostraram a existência desse ponto fixo anômalo ao estudarem o efeito Kondo em metais reais. Eles perceberam que no caso isotrópico (todos os acoplamentos com mesma intensidade) existia um ponto fixo além dos já conhecidos na literatura, mas afirmaram que ele não seria observável em sistemas físicos reais, pois seria instável sob qualquer perturbação. Entretanto, Cox [12] ao estudar o efeito Kondo quadrupolar em íons de urânio obteve um Hamiltoniano que podia ser mapeado em um Hamiltoniano de Kondo de dois canais, com acoplamento isotrópico. Ele percebeu que nesse regime o sistema apresenta comportamento não-líquido de Fermi. Posteriormente, Pang e Cox [23] estudaram a estabilidade deste ponto fixo isotrópico no Modelo de Kondo de dois canais analisando gráficos de níveis de energia obtidos pelo GRN. Usando o mesmo procedimento vamos analisar os pontos fixos do Modelo de Anderson de dois canais, que voltamos a ilustrar na Fig.4.1, e reproduzimos abaixo o seu Hamiltoniano após as transformações do GRN (ver Eq. 3.13)

$$\begin{aligned}
H_N = & \Lambda^{\frac{N-1}{2}} \left\{ \sum_{\alpha, \sigma, n=0}^{N-1} \epsilon_n (f_{n\sigma\alpha}^\dagger f_{n+1\sigma\alpha} + h.c.) + \right. \\
& + \sum_{\sigma, \alpha} V_\alpha (f_{-1, \sigma, \alpha}^\dagger f_{0, \sigma, \alpha} + h.c.) + E_0 \sum_{\sigma} |m, \sigma\rangle \langle m, \sigma| \\
& + E_{ex} \sum_{\alpha} (|m-1, \alpha\rangle \langle m-1, \alpha| + |m+1, \alpha\rangle \langle m+1, \alpha|). \quad (4.1)
\end{aligned}$$

Conforme discutido no Cap. 3, a Equação acima implica na seguinte relação de recor-

Modelo de Anderson de dois canais

Figura 4.1: Diagrama do modelo de Anderson de dois canais. O estado fundamental tem m elétrons, spin total σ diferente de zero e energia E_o . Os estados excitados têm $m \pm 1$ elétrons, spin total nulo e energia E_{ex} . Esses estados são hibridizados com a banda de condução através do termo proporcional a V_α em H_N . A diferença de energia $E_{ex} - E_0$ denominamos de Δ .

rência:

$$H_N = \sqrt{\Lambda} H_{N-1} + \xi_{N-1} (f_{N-1, \sigma, \alpha}^\dagger f_{N, \sigma, \alpha} + f_{N, \sigma, \alpha}^\dagger f_{N-1, \sigma, \alpha}) \equiv \sqrt{\Lambda} H_{N-1} + H_I, \quad (4.2)$$

onde $\xi_{N-1} = \Lambda^{(N-1)/2} \varepsilon_{N-1}$ sendo ε_n , $n = 0, 1, 2, \dots$, aqueles definidos por Wilson [15] (as somas sobre α e σ estão subentendidas). A Eq. 4.2 pode ser expressa na forma $H_N = \mathfrak{S}[H_{N-1}]$, que resume o processo de se obter os elementos de matriz de H_N conhecendo os autovalores e autovetores de H_{N-1} e as regras prescritas pelo GRN. Um Hamiltoniano H_N^* é um ponto fixo da transformação $\mathfrak{S}$ quando o conjunto de níveis de energia de muitos corpos de H_N se repete para diferentes valores de N [19]. Se aplicarmos a Eq. 4.2 duas vezes, multiplicaremos a escala de energia discreta por Λ , que, como já discutido no Capítulo 3, mantém inalterada a estrutura de níveis em torno do nível de Fermi. Por isso dizemos que quem tem ponto fixo é a transformação $\mathfrak{S}^2$ e não apenas $\mathfrak{S}$ (daí o fato dos pontos fixos serem em geral diferentes para N par e ímpar, como veremos adiante).

É possível visualizar o comportamento dos autovalores de H_N acompanhando-os durante todo o processo iterativo à medida que N cresce (isto é, à medida que a temperatura diminui - ver seção 3.8). O procedimento é simples: o programa computacional calcula, para cada N , todos os autovalores de cada subespaço $|j_1, j_2, s\rangle$ até um valor máximo

(corte de energia ou *cutoff*). Quando essas energias estabilizam com N temos o ponto fixo. A análise dos autovalores permite identificar os números quânticos associados ao estado fundamental e aos primeiros estados excitados e assim determinar se o sistema, por exemplo, é magnético ou não, se apresenta comportamento líquido de Fermi ou não, etc.

Nas próximas seções mostraremos os Hamiltonianos de ponto fixo da transformação $\mathfrak{S}^2$. As propriedades do modelo dependem dos parâmetros de hibridização V_1 e V_2 e da diferença $\Delta \equiv E_{ex} - E_0$ entre as energias dos estados localizados. Sendo assim, os diversos pontos fixos correspondem a valores determinados desses parâmetros.

4.1.1 Regime de impureza livre: $V_1 = V_2 = 0$ e Δ qualquer

Se na Eq. 4.1 arbitramos os valores $V_1 = V_2 = 0$ a expressão resultante é justamente o Hamiltoniano de uma impureza mais uma banda de condução livre (sistema desacoplado). Na Fig. 4.2 apresentamos dois pares de gráficos contendo apenas os primeiros níveis de energia em função do parâmetro de iteração N . No par (a), que corresponde a $\Delta = 0$, percebemos que os níveis de energia estabilizam em valores diferentes para N par ou ímpar. Isso é uma característica geral do GRN, reflexo da transformação ser $\mathfrak{S}^2$ e não $\mathfrak{S}$. Não é específico do modelo ou deste ponto fixo. No par (b), onde $\Delta = 0.2D$, observamos o mesmo ponto fixo, isto é, os mesmos valores de energia para N grande. Portanto o ponto fixo de impureza livre não depende de Δ , somente os autovalores iniciais são diferentes.

A estrutura de níveis de energia igualmente espaçadas mostrada na Fig. 4.2 caracteriza um comportamento de líquido de Fermi, isto é, qualquer energia de um estado de muitos corpos pode ser obtida do preenchimento de estados de partícula independente. Essa propriedade é natural da banda de condução livre.

A Fig. 4.2 também mostra a natureza do estado fundamental. Para facilitar a compreensão observemos a Fig. 4.3. O sistema físico divide a banda de condução em dois canais. Além disso, a discretização logarítmica e o GRN dividem cada canal em banda par (N par) e banda ímpar (N ímpar). Os níveis de energia para N par (banda par) que

Figura 4.2: Dois pares de gráficos de banda livre $V_1 = V_2 = 0$. Em (a) temos $\Delta = 0$ enquanto que em (b) $\Delta = 0.2$. Como a energia mantém-se constante em grande parte das iterações dizemos que o sistema está num regime de ponto fixo, no caso, de banda livre. A estrutura dos níveis de energia igualmente espaçados caracteriza comportamento de líquido de Fermi. Observe a natureza dos estados fundamentais para N par ou ímpar através dos seus números quânticos.

Figura 4.3: Preenchimento dos níveis de energia do sistema impureza e banda de condução livres (desacoplados). A banda é separada em canais 1 e 2. Cada canal tem banda par e banda ímpar. Existe uma defasagem intrínseca entre a banda par e ímpar devido à discretização logarítmica, sendo que a banda par tem um nível com energia zero (o que significa que ela pode estar vazia, com um ou com dois elétrons). Como não há nenhum tipo de acoplamento entre os canais e a impureza, as bandas par e ímpar de cada canal mantêm essa defasagem intrínseca.

observamos na Fig. 4.2 correspondem ao conjunto formado pela banda par do canal 1 mais a banda par do canal 2. Idem para os níveis de energia para N ímpar. Como já é conhecido da técnica do GRN [19], as bandas pares e ímpares estão defasadas, sendo que a banda par apresenta um nível com energia zero, que por isso, pode estar vazia, com um elétron ou com dois elétrons.

No caso de N ímpar, o estado fundamental é $|j_1 = 0, j_2 = 0, S = 1/2\rangle$, isto é, tem spin total não-nulo. Isso é fácil de entender, pois, a banda ímpar no estado fundamental está totalmente preenchida, portanto tem spin total zero. A impureza tem seu nível magnético $|m, \sigma\rangle$ abaixo dos níveis não-magnéticos $|m \pm 1, \alpha\rangle$ para $\Delta > 0$. Logo, o efeito resultante é que o sistema impureza mais banda ímpar tem spin total não-nulo.

No caso N par, a banda de condução tem um nível exatamente no nível de Fermi, de energia zero, e assim o preenchimento desse estado produz alta degenerescência entre os diferentes estados: estados com spin total nulo ou não e carga axial dos canais com valor nulo ou não. A impureza continua no seu estado fundamental com spin não-nulo.

Figura 4.4: Os gráficos têm parâmetros do regime anisotrópico $V_1 \neq V_2 \neq 0$. Podemos observar que esse ponto fixo independe dos valores de V_α e os níveis de mais baixa energia são igualmente espaçados. O estado fundamental para N ímpar é degenerado mostrando que um dos canais ficou livre (aquele com $|0,0,1/2\rangle$) e o outro canal blindou a impureza perfazendo efeito Kondo e resultando em spin total zero ($|0,1/2,0\rangle$ para $V_1 < V_2$ ou $|1/2,0,0\rangle$ para $V_1 > V_2$). Análise semelhante pode ser feita para N par. Como explicado no texto, não há distinção entre os níveis de energia para N par ou ímpar no ponto fixo.

O resultado é o estado fundamental degenerado em estados com spin nulo e não-nulo.

4.1.2 Regime anisotrópico: $V_1 \neq V_2$

Devemos agora considerar o Hamiltoniano completo, Eq. 4.1. Na Fig. 4.4, que tem $V_1 \neq V_2$, apresentamos dois pares de gráficos que representam casos anisotrópicos. Tanto o par (a) como o (b) mostram o mesmo ponto fixo para N par ou ímpar, apenas ocorrendo uma troca de canais se $V_1 > V_2$ ou $V_1 < V_2$, mostrando que o ponto fixo anisotrópico independe disso. Observamos que no caso anisotrópico os níveis de energia de N par e

Figura 4.5: Preenchimento dos níveis de energia do sistema impureza e banda de condução para o regime anisotrópico $V_1 \neq V_2$. Esse diagrama representa o caso particular em que $V_1 < V_2$, o que significa que no ponto fixo o canal 1 está livre e o canal 2 está totalmente acoplado com a impureza, blindando-a (efeito Kondo). Podemos observar que a banda par e ímpar do canal 1 não se modificam (banda livre), enquanto que no canal 2 os níveis de energia da banda par e da banda ímpar se invertem, efeito já conhecido na técnica do GRN.

ímpar também são igualmente espaçados e as energias de estados de muitos corpos (não mostrados na figura) são formadas pela combinação de N par e N ímpar do ponto fixo de banda livre. Portanto, ainda apresenta comportamento líquido de Fermi.

Para compreendermos a natureza do estado fundamental mostrado na Fig. 4.4, observemos a Fig. 4.5, que representa o caso em que $V_1 < V_2$. Quando N atinge valores grandes o canal 1 está livre e o canal 2 está totalmente acoplado com a impureza, blindando-a (Efeito Kondo). As bandas par e ímpar do canal 1 não se modificam (banda livre), enquanto que no canal 2 os níveis de energia da banda par e da banda ímpar se invertem, efeito já conhecido na técnica do GRN [15]. Como os níveis de energia para N par que observamos na Fig. 4.4 correspondem ao conjunto formado pela banda par do canal 1 mais a banda par do canal 2 (idem para N ímpar), o efeito resultante é a igualdade na estrutura dos níveis de energia de N par e N ímpar.

Ao contrário do ponto fixo de banda livre, o estado fundamental para N ímpar é agora degenerado: um dos canais é livre resultando no estado de spin $|0, 0, 1/2\rangle$ enquanto

que o outro canal está acoplado com a impureza (Efeito Kondo) resultando no estado de canal 2 $|0, 1/2, 0\rangle$ (se $V_1 < V_2$ como em (a)) ou estado de canal 1 $|1/2, 0, 0\rangle$ (se $V_1 > V_2$ como em (b)). Sendo assim, como nesse ponto fixo anisotrópico temos um canal livre e o outro perfazendo Efeito Kondo, não temos distinção entre iterações pares e ímpares, como observamos na Fig. 4.4.

O ponto fixo anisotrópico do modelo de Anderson de dois canais corresponde ao ponto fixo de acoplamento forte do modelo de Anderson de um canal.

4.1.3 Regime isotrópico: $V_1 = V_2$

Por fim, ainda considerando o Hamiltoniano completo (Eq. 4.1), analisamos o regime em que $V_1 = V_2 \neq 0$. Na Fig. 4.6 temos dois pares de gráficos mostrando que o ponto fixo isotrópico também não depende de V_1 e V_2 (desde que iguais).

Como podemos observar não é possível combinar os autovalores de banda livre para obter os níveis de energia do caso isotrópico. Em particular, esses níveis não são igualmente espaçados e as energias mostradas na Fig. 4.6 já são de muitos corpos. Portanto, nesse regime o sistema apresenta comportamento não-líquido de Fermi. Por não termos uma estrutura de partículas independentes torna-se bastante complexa a análise dos níveis de energia. Acreditamos que a igualdade entre os pontos fixos de N par e N ímpar seja porque a defasagem da banda de condução no caso isotrópico é π , enquanto que no caso anisotrópico é $\pi/2$.

Para uma análise cuidadosa do estado fundamental do sistema é mais seguro estudarmos a entropia da impureza, como faremos adiante.

Na Fig. 4.7 temos os diagramas de pontos fixos para o Modelo de Anderson tradicional (um canal) e para o Modelo de Anderson de dois canais no plano V_1, V_2 e $\Delta > 0$. Como explicamos, no Modelo de dois canais o regime anisotrópico têm os mesmos pontos fixos que o de um canal. Já no regime isotrópico, $V_1 = V_2$, aparece um novo ponto fixo com comportamento não-líquido de Fermi sem análogo no Modelo de Anderson tradicional. Esse novo ponto fixo é instável com relação à sua anisotropia de hibridização ($V_1 \neq V_2$).

Figura 4.6: Ponto fixo isotrópico, com $V_1 = V_2 \neq 0$. Podemos observar que esse ponto fixo independe dos valores de V_1 e V_2 . Os níveis de energia não são resultados da combinação de N par e N ímpar do ponto fixo de banda livre, nem são igualmente espaçados. O estado fundamental tem spin total $1/2$, refletindo a super compensação dos elétrons de condução dos dois canais.

Figura 4.7: Diagramas de pontos fixos. a) Diagrama do Modelo de Anderson de um canal: OL é o ponto fixo de orbital livre, ML é o ponto fixo de momento local e FA é o ponto fixo fortemente acoplado. b) Diagrama de pontos fixos do Modelo de Anderson de dois canais. Além dos pontos fixos anteriores, que aparecem no regime anisotrópico, aparece um novo ponto fixo no regime isotrópico. Como veremos, esse novo ponto fixo têm comportamento de sistema não-líquido de Fermi.

Esses resultados foram apresentados no *International Conference on Magnetism 2000* (ICM2000) e constarão do *proceedings* deste encontro, que será publicado no *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, em 2001 [26].

Todos esses comportamentos aparecem de forma explícita nas curvas termodinâmicas. Na próxima seção apresentamos a suscetibilidade magnética.

4.2 Suscetibilidade magnética

A Eq. 4.2 define uma seqüência de Hamiltonianos $\{H_N, N = 0, 1, 2, \dots\}$, em que para cada N temos uma escala de energia associada (à medida que N cresce a temperatura diminui, isto é, existe uma relação imediata entre N e a temperatura - ver seção 3.8). Em cada N usamos o espectro de H_N para calcular médias termodinâmicas. Por exemplo, a suscetibilidade magnética é calculada através da seguinte definição geral:

$$\frac{k_B T \chi}{(g \mu_B)^2} = \langle S_z^2 \rangle - \langle S_z \rangle^2, \quad (4.3)$$

Figura 4.8: Regime anisotrópico - temperatura vezes suscetibilidade em função de $k_B T/D$, para vários parâmetros do modelo, todos em unidade da meia-largura da banda D . Para $\Delta > 0$ o sistema desenvolve momento local e $T\chi$ se aproxima de $1/4$ (a,b,c). Para $\Delta < 0$, não há formação de momento local e $T\chi$ vai a zero rapidamente (d).

onde S_z é a componente z do spin total. Nos gráficos que seguem é mostrada a *contribuição da impureza* à suscetibilidade, que é obtida subtraindo-se o valor de $T\chi$ da banda livre daquele calculado pela equação acima.

4.2.1 Regime anisotrópico: $V_1 \neq V_2$

A Fig. 4.8 mostra curvas de $T\chi$ em função da temperatura para diversos valores dos parâmetros do modelo. Assim como no caso Anderson tradicional, aqui também podemos destacar três regiões importantes nessa figura. Para $k_B T \gg \Delta$, as seis configurações $|m, \sigma = \pm 1/2\rangle$ e $|m \pm 1, \alpha = 1, 2\rangle$ estão praticamente degeneradas e o acoplamento V_α com a banda pode ser desconsiderado. Como temos duas configurações magnéticas ($|m, \sigma = \pm 1/2\rangle$) a média de S_z^2 vale $[(1/2)^2 + (-1/2)^2]/6 = 1/12 = 0.0833$, valor claramente visto na Fig. 4.8. Esse limite corresponde ao ponto fixo de impureza (ou banda) livre.

À medida que a temperatura diminui, a separação Δ entre os níveis não-magnéticos e os magnéticos passa a ser percebida. Se $\Delta > 0$ os estados de mais baixa energia da

Figura 4.9: Regime anisotrópico - temperatura vezes suscetibilidade em função da temperatura T escalada pela temperatura Kondo T_K . A curva cheia representa o comportamento universal de $T\chi$ do Modelo de Kondo de um canal. Quando $T = T_K$ temos que $T_K\chi(T_K) = 0.0705$. Usamos esse critério para descobrir a temperatura Kondo de cada curva acima.

impureza são $|m, \sigma = \pm 1/2\rangle$, portanto, temos duas configurações e a média de S_z^2 agora tende para ao valor $[(1/2)^2 + (-1/2)^2]/2 = 1/4$. Essa tendência é clara em três das curvas da Fig. 4.8 (a,b,c). O valor $1/4$ caracteriza o ponto fixo de momento local. Lembramos que é esse o valor para $T\chi$ calculado pelo Modelo de Kondo em altas temperaturas. Para $\Delta < 0$, o estado de mais baixa energia da impureza é $|m \pm 1, \alpha = 1, 2\rangle$, portanto, não-magnético e então $T\chi$ tende a zero. Isso pode ser visto na curva (d) da Fig. 4.8.

Quando a temperatura for da ordem da largura $\Gamma = \pi\rho V_m^2$, onde $V_m = \max(V_1, V_2)$ e ρ é a densidade de estados no nível de Fermi, a impureza passa a ser fortemente acoplada com a banda, e então, fortemente blindada por ela. É o começo da ressonância Kondo, que termina por anular o valor de $T\chi$ linearmente com T . Esse regime corresponde ao ponto fixo estável de acoplamento forte. Isso é exibido pelas curvas com $\Delta > 0$ na Fig. 4.8. Para mostrar que de fato o comportamento dessas curvas é do tipo Kondo, a Fig. 4.9 mostra que todas elas têm o mesmo comportamento universal, quando a temperatura é escalada pela temperatura Kondo T_K , característico do Efeito Kondo. A curva contínua

nessa figura foi obtida analiticamente pelo ansatz de Bethe [16]. Para achar o valor de T_K para cada curva procedemos da seguinte maneira: da curva universal, ou mesmo dos cálculos numéricos de Wilson usando o GRN, sabemos que

$$\frac{K_B T_K \chi(T_K)}{(g\mu_B)^2} = 0.0705. \quad (4.4)$$

Daí então, simplesmente atribuímos diferentes valores a T_K até ajustarmos a curva numérica com esse valor de $T_K \chi(T_K)$. Vemos que para $T \gg T_K$ não há universalidade em $T\chi$.

4.2.2 Regime isotrópico: $V_1 = V_2$

Na Fig. 4.10 apresentamos a suscetibilidade magnética correspondente ao regime isotrópico. Para a separação $\Delta < 0$, ou seja, com as configurações $|m \pm 1, \alpha\rangle$ tendo mais baixa energia que $|m, \sigma\rangle$, não temos formação de momento magnético, e como mostra a Fig. 4.10 (a), $T\chi$ vai a zero sem se aproximar do ponto fixo de momento local.

Para $\Delta > 0$ e fixo, as curvas (b) e (c) da Fig. 4.10 mostram que quanto maior a hibridização $V_1 = V_2$ menos a curva se aproxima do ponto fixo de momento local ($T\chi = 1/4$), pois, a blindagem pela banda de condução é mais forte ou, em outras palavras, o Efeito Kondo ocorre em temperaturas mais altas (maior T_K).

Para $V_1 = V_2$ fixo as curvas (c) e (d) da Fig. 4.10 mostram que quanto maior for Δ mais a curva se aproxima do ponto fixo de momento local e essa aproximação ocorre em temperaturas mais altas. Isso porque, conforme a temperatura é abaixada desde seu valor próximo à largura da banda, a separação Δ é percebida mais cedo conforme maior seja o seu valor.

A curva (e) da Fig. 4.10 mostra que para valores bem pequenos das hibridizações o produto $T\chi$ fica quase constante e próximo do valor $1/4$ do momento local.

Tal qual no modelo de Anderson de um canal, esperamos que no modelo aqui tratado também haja em baixas temperaturas uma única escala de energia característica, a temperatura Kondo. Ou seja, $T\chi$ deve apresentar um comportamento universal quando

Figura 4.10: Regime isotrópico - suscetibilidade magnética versus temperatura. Para $\Delta > 0$ (curvas b,c,d,e) há formação de momento local, enquanto para $\Delta < 0$ não (curva a).

expresso em termos de T/T_K . A Fig. 4.11 confirma isso ao mostrar que curvas para diferentes parâmetros do modelo se justapõem numa só em baixas temperaturas, quando escaladas pelos respectivas T_K . Os valores de T_K foram obtidos usando-se o mesmo critério que no caso de um canal, ou seja $k_B T_K \chi(T_K)/(g \mu_B)^2 = 0.0705$ (apesar de não justificarmos isso de maneira rigorosa).

Embora as curvas da Fig. 4.10 se pareçam com aquelas da Fig. 4.8, na verdade mostram comportamentos bem diferentes. Isso fica claro na Fig. 4.11 quando comparamos com a curva universal de Kondo para um canal (curva contínua). Enquanto com um canal a blindagem é efetiva, isto é, o valor efetivo do momento magnético, medido pelo valor de $T\chi$, vai a zero linearmente com T/T_K , no caso de dois canais essa blindagem não é tão efetiva uma vez que a banda de condução blinda exageradamente resultando num spin líquido não-nulo para a impureza (vale lembrar que a impureza tem spin 1/2 e cada canal de condução também tem spin 1/2). O valor efetivo do momento magnético nesse caso

Figura 4.11: Regime isotrópico - suscetibilidade magnética vezes temperatura em função de T/T_K para vários escalados pela temperatura de Kondo T_K . A linha cheia é a curva universal de Kondo para um canal. A curva contínua indicada pela seta mostra o comportamento $-T \ln T$ em baixas temperaturas.

vai a zero com $-T/T_K \ln(T/T_K)$ [24, 25, 8]. Nós mostramos na Fig. 4.11 que a função

$$\frac{k_B T \chi}{(g \mu_B)^2} = -0.103 \frac{T}{T_K} \ln\left(\frac{T}{T_K}\right) \quad (4.5)$$

coincide com as curvas escaladas por T_K , para $T \ll T_K$. O valor 0.103 foi encontrado empiricamente e independe de T_K (ver Cap. 2).

Também esses resultados foram apresentados no *International Conference on Magnetism 2000* (ICM2000) e constarão do *proceedings* deste encontro, que será publicado no *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, em 2001 [27].

Na próxima seção apresentamos o calor específico.

4.3 Calor específico

Calculamos o calor específico através da definição geral:

$$\frac{C}{k_B} = \beta^2 \left(\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2 \right) , \quad (4.6)$$

onde E são os autovalores de H_N em cada iteração. No gráfico a seguir é mostrada a *contribuição da impureza* ao calor específico (C_{imp}), que é obtida subtraindo-se o valor de C da banda livre daquele calculado pela equação acima.

A qualidade das curvas de calor específico é bem inferior daquelas da suscetibilidade. A razão é que enquanto antes calculávamos diretamente $T\chi$ através dos valores de $\langle S_z^2 \rangle$ fornecidos pelo GRN, agora para determinar C_{imp} devemos *dividir por* $(k_B T)^2$ os valores de $\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2$. Sendo assim, em temperaturas digamos da ordem de 10^{-8} significa multiplicar $\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2$ por 10^{16} , o que salienta enormemente os erros intrínsecos do cálculo numérico. Uma forma de minimizar esses erros é trabalhar com valores do parâmetro de discretização Λ próximos à unidade, o que exige enormes quantidades de tempo e espaço de processamento. A próxima seção, no entanto, prescreve superficialmente um procedimento alternativo do GRN que pode contribuir para uma melhora significativa das curvas de calor específico.

Tanto o regime isotrópico como o anisotrópico devem coincidir em altas temperaturas, uma vez que as hibridizações devem ser desprezíveis. De fato, pela Fig. 4.12, para $k_B T \gg \Delta$ o calor específico exibe o pico de Schottky, que reflete apenas a separação Δ entre os estados localizados. Para $k_B T < \Delta$ apenas os estados degenerados $|m, \sigma\rangle$ passam a ser importantes e portanto o calor específico diminui drasticamente.

No entanto, para $k_B T \ll \Delta$ o forte acoplamento desse estado $|m, \sigma\rangle$ com a banda forma, no caso anisotrópico, um estado tripleto, de alta energia, e um estado singleto fundamental. Da separação entre esses estados nasce o pico do calor específico em baixas temperaturas. Isso é o que se chama pico Kondo. Em mais baixas temperaturas apenas o singleto sobrevive e portanto o calor específico volta a se anular, linearmente com T/T_k

Figura 4.12: No gráfico de cima temos a contribuição da impureza ao calor específico em função de $k_B T/D$ para o regime anisotrópico e para o regime isotrópico. Como é esperado, em altas temperaturas as curvas coincidem. Já em baixas temperaturas a curva azul (anisotrópica) tem comportamento de líquido de Fermi, enquanto a outra mostra comportamento não-líquido de Fermi, como pode ser observado no inset. A linha contínua sobre pico à esquerda na curva anisotrópica é a curva universal de Kondo de uma canal com $T_K = 1.2 \cdot 10^{-6} D$. No gráfico de baixo temos os graus de liberdade da impureza obtidos através da exponencial da entropia. A temperatura T_K para a curva isotrópica é $1.8 \cdot 10^{-7} D$.

nesse caso anisotrópico. A linha contínua sobre esse pico na Fig. 4.12 é a curva universal de Kondo de um canal com $T_k = 1.2 \cdot 10^{-6} D$ que, como observamos, se ajusta muito bem à curva do calor específico do regime anisotrópico. A mesma boa concordância obtivemos com a curva (a) da Fig. 4.9, em que usamos $T_k = 1.1 \cdot 10^{-6} D$ para escalar a suscetibilidade magnética.

A física do caso isotrópico é bastante parecida com a descrita acima, mas para $k_B T \ll \Delta$ não há a formação do singleto e sim de um estado em que uma impureza de spin 1/2 está envolta por dois canais de condução, cada um com spin 1/2, resultando num *objeto* complexo que não tem spin total 1/2 como se esperaria de forma simplista. Isso pode ser apreciado nas curvas da entropia S_{imp} da Fig. 4.12, ou melhor, nas curvas de e^{S_{imp}/k_B} , que mede o número de graus de liberdade da impureza. A entropia é calculada via o calor específico através de

$$S_{imp}(T) = \int_0^T C_{imp} d(\ln T) . \quad (4.7)$$

Para altas temperaturas os seis graus de liberdade, $|m, \sigma\rangle$ mais $|m \pm 1, \alpha = 1, 2\rangle$, estão degenerados e portanto e^{S_{imp}/k_B} se aproxima de 6; esse é o ponto fixo de impureza (ou banda) livre. Abaixando a temperatura apenas os estados $|m, \sigma\rangle$ são acessados (os estados $|m \pm 1, \alpha = 1, 2\rangle$ são acessados virtualmente) e portanto e^{S_{imp}/k_B} tende ao valor 2, como se vê pela aproximação das curvas à linha pontilhada. Esse é o ponto fixo de momento local. Ao abaixarmos ainda mais a temperatura é que veremos a grande distinção entre os casos anisotrópico e isotrópico. Enquanto no primeiro caso e^{S_{imp}/k_B} tende a 1, ou seja, temos apenas um estado de impureza contribuindo, que é o singleto de Kondo, no segundo caso e^{S_{imp}/k_B} tende ao valor 1.4, muito próximo do valor $\sqrt{2} = 1.414...$ previsto pelo ansatz de Bethe para o Modelo de Kondo de dois canais. Esse valor $\sqrt{2}$ revela que o estado final não é um singleto (que resultaria $e^{S_{imp}/k_B} = 1$), como no caso de um canal, nem um spin 1/2 livre (que resultaria em $e^{S_{imp}/k_B} = 2$).

Apesar da baixa qualidade das curvas de calor específico, as curvas de entropia são muito boas, já que para obtê-las foi feita uma integração de C_{imp} na escala logarítmica.

Outras grandezas dependentes de C_{imp} podem ter valores ruins, como por exemplo, a chamada razão de Wilson

$$R = \frac{4\pi^2}{3} \frac{k_B T \chi}{C/k_B}, \quad (4.8)$$

cujos valores exatos são 2 e 8/3 respectivamente para o Modelo de Kondo de um e dois canais [9]. Os valores obtidos de nossas simulações chegam a ter erros da ordem de 100% para o caso isotrópico; para o caso anisotrópico esse erro é bem menor.

Finalmente, mostramos no inset da Fig. 4.12, cujo eixo das temperaturas é linear, que o calor específico isotrópico não segue a lei linear em baixas temperaturas e, portanto, exibe comportamento não-líquido de Fermi. A curva contínua é a função

$$C/k_B = -0.24 \frac{T}{T_K} \ln \frac{T}{T_K}, \quad (4.9)$$

obtida empiricamente, mas que indica concordância com a dependência $-T \ln T$ prevista teoricamente para $T \ll T_K$ [24, 25, 8]. Já o caso anisotrópico nesse inset mostra o comportamento linear esperado para um sistema com propriedades de líquido de Fermi.

4.4 Sugestões para trabalhos futuros

Um dos pontos críticos deste trabalho é a implementação do GRN para o problema envolvendo dois canais, o que exige um esforço computacional enorme, particularmente no que se refere ao manuseio de memória de processamento. Isso porque a cada passo do GRN a base de estados em que H_N é diagonalizada é aumentada de um fator 16 (há quatro estados de um canal para cada um dos quatro do outro canal - ver Cap. 3). Como se viu acima, isso não foi problema para o cálculo de $T\chi$, mas para C_{imp} foi limitante. Para contornar essa limitação propomos a implementação do GRN em duas etapas sucessivas a cada iteração N , cada uma aumentando a base de estados de apenas um fator 4 (os quatro estados de um dos canais). Procedimento semelhante foi feito para o caso do Modelo de Kondo de duas impurezas magnéticas na Ref. [48] e achamos que pode ser bem

sucedido aqui também. Isso exige uma programação mais sofisticada mas acreditamos que a experiência gerada neste trabalho de tese venha contribuir muito para essa tarefa. Uma vez implementado, esse novo procedimento deve exigir menos espaço de memória e portanto possibilitar o uso de parâmetros de discretização Λ mais próximos da unidade, bem como maiores energias de corte, etc.

No estudo do Modelo de Kondo de dois canais o cálculo de propriedades dinâmicas, como a resistividade, tem fornecido muitas informações relevantes. A experiência no Modelo de Anderson de um canal nos abilita a implementar o mesmo cálculo aqui, se a idéia do novo processo iterativo descrito no parágrafo anterior der bons resultados.

No que concerne ao estudo dos pontos fixos do modelo de dois canais, será bastante interessante estudar a natureza do operador responsável pela instabilidade do ponto fixo isotrópico frente à anisotropia por hibridização ($V_1 \neq V_2$), isto é, se esse operador é relevante ou marginal.

Finalmente, um estudo mais detalhado do GRN pode nos indicar o caminho para obtermos uma expressão perturbativa para a curva universal de $T\chi$ em baixas temperaturas, a exemplo do que fez Wilson para o caso de um canal.

Os Modelos de Anderson e Kondo tradicionais já mostraram suas enormes potencialidades ao descrever sistemas de impurezas localizadas. Suas generalizações incluindo graus de liberdade adicionais à banda de condução ampliaram o universo de aplicabilidade desses modelos. Paralelamente, modelos em que há acoplamento entre impurezas estão evoluindo e se tornando mais realistas. A união desses dois limites – modelos em rede com bandas exibindo canais – deverá ajudar o estudo de materiais reais.

Apêndice A

Construção dos vetores da base

A construção dos vetores da base em que H_N será diagonalizado é feita usando o Teorema de Wigner-Eckart e álgebra vetorial [45]. Por exemplo vamos construir o vetor

$$|j_1, j_{1z}, j_2, j_{2z}, s, s_z; 1\rangle_N, \quad (\text{A.1})$$

onde à esquerda do ponto-e-vírgula está o resultado final, isto é, um estado com carga axial j_1 com componente j_{1z} , carga axial j_2 com componente j_{2z} e spin s com componente s_z ; e à direita do ponto-e-vírgula está o tipo que foi usado para obter este estado.

A Tabela 3.2 fornece o procedimento correspondente ao tipo 1. Este procedimento permite identificar na Tabela 3.1 os estados de canal que combinados com o auto-estado da iteração anterior $(N - 1)$ resulta no estado $|j_1, j_{1z}, j_2, j_{2z}, s, s_z; 1\rangle_N$. Conhecendo os estados de canal e o procedimento (tipo) determina-se os números quânticos do auto-estado de $N - 1$. É importante observar que devido à definição de carga axial 3.16 e 3.17, o par de elétrons em um canal na iteração N é acompanhado pelo sinal $(-1)^N$. Cada auto-estado da iteração $N - 1$ é combinado com os 16 tipos usando o Teorema de Wigner-Eckart 3.29 - por exemplo, Tabela 2³ de Condon and Odabasi (pg.149) para adicionar spin 1 [45] e Tabela 1³ (pg. 149) para adicionar spin e carga axial 1/2.

São ao todo 16 tipos de vetores possíveis na base de H_N . Como exemplo apresentamos a seguir o vetor da base formado pelo tipo 1. Na expressão abaixo j_1 , j_2 e s são números

quânticos dos estados da iteração N ($|j_1, j_{1z}, j_2, j_{2z}, s, s_z; 1\rangle \equiv |1\rangle$):

$$\begin{aligned}
|1\rangle &= \sqrt{\frac{j_2 + j_{2z}}{2j_2}} \left\{ \sqrt{\frac{j_1 + j_{1z}}{2j_1}} |j_1 - \frac{1}{2}, j_{1z} - \frac{1}{2}, j_2 - \frac{1}{2}, j_{2z} - \frac{1}{2}, s, s_z; \uparrow\downarrow, \uparrow\downarrow\rangle \right. \\
&+ (-1)^N \sqrt{\frac{j_1 - j_{1z}}{2j_1}} |j_1 - \frac{1}{2}, j_{1z} + \frac{1}{2}, j_2 - \frac{1}{2}, j_{2z} - \frac{1}{2}, s, s_z; 0, \uparrow\downarrow\rangle \left. \right\} \\
&+ \sqrt{\frac{j_2 - j_{2z}}{2j_2}} \left\{ (-1)^N \sqrt{\frac{j_1 + j_{1z}}{2j_1}} |j_1 - \frac{1}{2}, j_{1z} - \frac{1}{2}, j_2 - \frac{1}{2}, j_{2z} + \frac{1}{2}, s, s_z; \uparrow\downarrow, 0\rangle \right. \\
&+ \left. \sqrt{\frac{j_1 - j_{1z}}{2j_1}} |j_1 - \frac{1}{2}, j_{1z} + \frac{1}{2}, j_2 - \frac{1}{2}, j_{2z} + \frac{1}{2}, s, s_z; 0, 0\rangle \right\} \quad (A.2)
\end{aligned}$$

Como os auto-estados de H_N não dependem de j_{1z} , j_{2z} ou s_z , podemos escolher trabalhar com

$$j_{1z} = j_1 \quad (A.3)$$

$$j_{2z} = j_2 \quad (A.4)$$

$$s_z = s \quad (A.5)$$

o que diminui consideravelmente a quantidade de cálculo.

Abaixo listamos as expressões obtidas ($|j_1, j_{1z}, j_2, j_{2z}, s, s_z; k\rangle \equiv |k\rangle$):

$$|1\rangle = |j_1 - 1/2, j_1 - 1/2, j_2 - 1/2, j_2 - 1/2, s, s; \uparrow\downarrow, \uparrow\downarrow\rangle \quad (A.6)$$

$$|2\rangle = (-1)^N |j_1 - 1/2, j_1 - 1/2, j_2, j_2, s - 1/2, s - 1/2; \uparrow\downarrow, \uparrow\rangle \quad (A.7)$$

$$\begin{aligned}
|3\rangle &= -\sqrt{\frac{1}{2s+2}} (-1)^N |j_1 - 1/2, j_1 - 1/2, j_2, j_2, s + 1/2, s - 1/2; \uparrow\downarrow, \uparrow\rangle \\
&+ \sqrt{\frac{2s+1}{2s+2}} (-1)^N |j_1 - 1/2, j_1 - 1/2, j_2, j_2, s + 1/2, s + 1/2; \uparrow\downarrow, \downarrow\rangle \quad (A.8)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
|4\rangle &= -\sqrt{\frac{1}{2j_2+2}}|j_1-1/2, j_1-1/2, j_2+1/2, j_2-1/2, s, s; \uparrow\downarrow, \uparrow\downarrow\rangle \\
&+ \sqrt{\frac{2j_2+1}{2j_2+2}}(-1)^N|j_1-1/2, j_1-1/2, j_2+1/2, j_2+1/2, s, s; \uparrow\downarrow, 0\rangle
\end{aligned} \tag{A.9}$$

$$|5\rangle = (-1)^N|j_1, j_1, j_2-1/2, j_2-1/2, s-1/2, s-1/2; \uparrow, \uparrow\downarrow\rangle \tag{A.10}$$

$$\begin{aligned}
|6\rangle &= -\sqrt{\frac{1}{2s+2}}(-1)^N|j_1, j_1, j_2-1/2, j_2-1/2, s+1/2, s-1/2; \uparrow, \uparrow\downarrow\rangle \\
&+ \sqrt{\frac{2s+1}{2s+2}}(-1)^N|j_1, j_1, j_2-1/2, j_2-1/2, s+1/2, s+1/2; \downarrow, \uparrow\downarrow\rangle
\end{aligned} \tag{A.11}$$

$$|7\rangle = |j_1, j_1, j_2, j_2, s-1, s-1; \uparrow, \uparrow\rangle \tag{A.12}$$

$$|8\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|j_1, j_1, j_2, j_2, s, s; \uparrow, \downarrow\rangle - |j_1, j_1, j_2, j_2, s, s; \downarrow, \uparrow\rangle) \tag{A.13}$$

$$\begin{aligned}
|9\rangle &= -\sqrt{\frac{1}{s+1}}|j_1, j_1, j_2, j_2, s, s-1; \uparrow, \uparrow\rangle \\
&+ \frac{s}{\sqrt{2s(s+1)}}(|j_1, j_1, j_2, j_2, s, s; \uparrow, \downarrow\rangle + |j_1, j_1, j_2, j_2, s, s; \downarrow, \uparrow\rangle)
\end{aligned} \tag{A.14}$$

$$\begin{aligned}
|10\rangle &= \sqrt{\frac{2}{(2s+2)(2s+3)}}|j_1, j_1, j_2, j_2, s+1, s-1; \uparrow, \uparrow\rangle \\
&- \sqrt{\frac{2s+1}{2s+2}(2s+3)}(|j_1, j_1, j_2, j_2, s+1, s; \uparrow, \downarrow\rangle + |j_1, j_1, j_2, j_2, s+1, s; \downarrow, \uparrow\rangle) \\
&+ \sqrt{\frac{2s+1}{2s+3}}|j_1, j_1, j_2, j_2, s+1, s+1; \downarrow, \downarrow\rangle
\end{aligned} \tag{A.15}$$

$$\begin{aligned}
|11\rangle &= -(-1)^N\sqrt{\frac{1}{2j_2+2}}|j_1, j_1, j_2+1/2, j_2-1/2, s-1/2, s-1/2; \uparrow, \uparrow\downarrow\rangle \\
&+ \sqrt{\frac{2j_2+1}{2j_2+2}}|j_1, j_1, j_2+1/2, j_2+1/2, s-1/2, s-1/2; \uparrow, 0\rangle
\end{aligned} \tag{A.16}$$

$$\begin{aligned}
|12\rangle &= -\sqrt{\frac{1}{2s+2}} \left\{ -(-1)^N \sqrt{\frac{1}{2j_2+2}} |j_1, j_1, j_2+1/2, j_2-1/2, s+1/2, s-1/2; \uparrow, \uparrow\downarrow\rangle \right. \\
&+ \left. \sqrt{\frac{2j_2+1}{2j_2+2}} |j_1, j_1, j_2+1/2, j_2+1/2, s+1/2, s-1/2; \uparrow, 0\rangle \right\} \\
&+ \sqrt{\frac{2s+1}{2s+2}} \left\{ -(-1)^N \sqrt{\frac{1}{2j_2+2}} |j_1, j_1, j_2+1/2, j_2-1/2, s+1/2, s+1/2; \downarrow, \uparrow\downarrow\rangle \right. \\
&+ \left. \sqrt{\frac{2j_2+1}{2j_2+2}} |j_1, j_1, j_2+1/2, j_2+1/2, s+1/2, s+1/2; \downarrow, 0\rangle \right\} \quad (A.17)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
|13\rangle &= -\sqrt{\frac{1}{2j_1+2}} |j_1+1/2, j_1-1/2, j_2-1/2, j_2-1/2, s, s; \uparrow\downarrow, \uparrow\downarrow\rangle \\
&+ \sqrt{\frac{2j_1+1}{2j_1+2}} (-1)^N |j_1+1/2, j_1+1/2, j_2-1/2, j_2-1/2, s, s; 0, \uparrow\downarrow\rangle \quad (A.18)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
|14\rangle &= -(-1)^N \sqrt{\frac{1}{2j_1+2}} |j_1+1/2, j_1-1/2, j_2, j_2, s-1/2, s-1/2; \uparrow\downarrow, \uparrow\rangle \\
&+ \sqrt{\frac{2j_1+1}{2j_1+2}} |j_1+1/2, j_1+1/2, j_2, j_2, s-1/2, s-1/2; 0, \uparrow\rangle \quad (A.19)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
|15\rangle &= -\sqrt{\frac{1}{2s+2}} \left\{ -(-1)^N \sqrt{\frac{1}{2j_1+2}} |j_1+1/2, j_1-1/2, j_2, j_2, s+1/2, s-1/2; \uparrow\downarrow, \uparrow\rangle \right. \\
&+ \left. \sqrt{\frac{2j_1+1}{2j_1+2}} |j_1+1/2, j_1+1/2, j_2, j_2, s+1/2, s-1/2; 0, \uparrow\rangle \right\} \\
&+ \sqrt{\frac{2s+1}{2s+2}} \left\{ -(-1)^N \sqrt{\frac{1}{2j_1+2}} |j_1+1/2, j_1-1/2, j_2, j_2, s+1/2, s+1/2; \uparrow\downarrow, \downarrow\rangle \right. \\
&+ \left. \sqrt{\frac{2j_1+1}{2j_1+2}} |j_1+1/2, j_1+1/2, j_2, j_2, s+1/2, s+1/2; 0, \downarrow\rangle \right\} \quad (A.20)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
|16\rangle &= -\sqrt{\frac{1}{2j_2+2}} \left\{ -\sqrt{\frac{1}{2j_1+2}} |j_1+1/2, j_1-1/2, j_2+1/2, j_2-1/2, s, s; \uparrow\downarrow, \uparrow\downarrow\rangle \right. \\
&+ \left. (-1)^N \sqrt{\frac{2j_1+1}{2j_1+2}} |j_1+1/2, j_1+1/2, j_2+1/2, j_2-1/2, s, s; 0, \uparrow\downarrow\rangle \right\} \\
&+ \sqrt{\frac{2j_2+1}{2j_2+2}} \left\{ -(-1)^N \sqrt{\frac{1}{2j_1+2}} |j_1+1/2, j_1-1/2, j_2+1/2, j_2+1/2, s, s; \uparrow\downarrow, 0\rangle \right. \\
&+ \left. \sqrt{\frac{2j_1+1}{2j_1+2}} |j_1+1/2, j_1+1/2, j_2+1/2, j_2+1/2, s, s; 0, 0\rangle \right\} . \quad (A.21)
\end{aligned}$$

Apêndice B

Construção dos elementos de matriz

Devemos calcular os elementos de matriz $\langle j'_1, j'_2, s', tipo' | H_N | j_1, j_2, s, tipo \rangle$ usando a transformação definida pelo GRN (Eq. 3.32) que reescrevemos aqui

$$H_N = \sqrt{\Lambda} H_D + \xi_{N-1} H_I \quad (\text{B.1})$$

$$H_D = H_{N-1} \quad (\text{B.2})$$

$$H_I = f_{N-1, \sigma, \alpha}^\dagger f_{N, \sigma, \alpha} + f_{N, \sigma, \alpha}^\dagger f_{N-1, \sigma, \alpha} \quad (\text{B.3})$$

Os elementos diagonais de H_N nada mais são que os autovalores da iteração anterior multiplicados por $\sqrt{\Lambda}$. Já os elementos não diagonais são bem mais complicados. Como o exemplo vamos calcular o elemento de matriz $\langle 12 | H_I | 4 \rangle_N$.

a) Do Apêndice A temos os vetores $|4\rangle_N$ e $|12\rangle_N$, que apresentamos na Tabela B.1.

O vetor $|4\rangle_N$ tem dois kets e o vetor $|12\rangle_N$ tem quatro kets. Para formar um elemento de matriz devemos combinar cada ket de um vetor com todos os outros kets do outro vetor. Verifica-se que algumas combinações são nulas.

$ 4\rangle_N$
$= -\sqrt{\frac{1}{2j_2+2}} j_1 - \frac{1}{2}, j_1 - \frac{1}{2}, j_2 + \frac{1}{2}, j_2 - \frac{1}{2}, s, s; \uparrow\downarrow, \uparrow\downarrow\rangle_N +$
$+\sqrt{\frac{2j_2+1}{2j_2+2}}(-1)^N j_1 - \frac{1}{2}, j_1 - \frac{1}{2}, j_2 + \frac{1}{2}, j_2 + \frac{1}{2}, s, s; \uparrow\downarrow, 0\rangle_N$
$ 12\rangle_N$
$= (-1)^N \sqrt{\frac{1}{2s+2}} \sqrt{\frac{1}{2j_2+2}} j_1, j_1, j_2 + \frac{1}{2}, j_2 - \frac{1}{2}, s + \frac{1}{2}, s - \frac{1}{2}; \uparrow, \uparrow\downarrow\rangle_N -$
$-\sqrt{\frac{1}{2s+2}} \sqrt{\frac{2j_2+1}{2j_2+2}} j_1, j_1, j_2 + \frac{1}{2}, j_2 + \frac{1}{2}, s + \frac{1}{2}, s - \frac{1}{2}; \uparrow, 0\rangle_N +$
$-(-1)^N \sqrt{\frac{2s+1}{2s+2}} \sqrt{\frac{1}{2j_2+2}} j_1, j_1, j_2 + \frac{1}{2}, j_2 - \frac{1}{2}, s + \frac{1}{2}, s + \frac{1}{2}; \downarrow, \uparrow\downarrow\rangle_N +$
$+\sqrt{\frac{2s+1}{2s+2}} \sqrt{\frac{2j_2+1}{2j_2+2}} j_1, j_1, j_2 + \frac{1}{2}, j_2 + \frac{1}{2}, s + \frac{1}{2}, s + \frac{1}{2}; \downarrow, 0\rangle_N$

Tabela B.1: Dois vetores da base da iteração N : aqui $|4\rangle_N$ significa vetor gerado pelo procedimento *tipo 4* enquanto $|12\rangle_N$ significa vetor gerado pelo procedimento *tipo 12* (ver Tabela 3.2).

b) Construimos o elemento de matriz $\langle 12| f_{N-1,\sigma,\alpha}^\dagger f_{N,\sigma,\alpha} |4\rangle_N$

$$\langle 12| H_I |4\rangle_N =$$

$$= -(-1)^N \sqrt{\frac{1}{2s+2}} \sqrt{\frac{1}{2j_2+2}} \sqrt{\frac{1}{2j_2+2}}.$$

$$\cdot \langle j_1, j_1, j_2 + \frac{1}{2}, j_2 - \frac{1}{2}, s + \frac{1}{2}, s - \frac{1}{2}; \uparrow, \uparrow\downarrow | f_{N-1,1\downarrow}^\dagger f_{N,1\downarrow} | j_1 - \frac{1}{2}, j_1 - \frac{1}{2}, j_2 + \frac{1}{2}, j_2 - \frac{1}{2}, s, s; \uparrow\downarrow, \uparrow\downarrow \rangle_N -$$

$$- (-1)^N \sqrt{\frac{1}{2s+2}} \sqrt{\frac{2j_2+1}{2j_2+2}} \sqrt{\frac{2j_2+1}{2j_2+2}}.$$

$$\cdot \langle j_1, j_1, j_2 + \frac{1}{2}, j_2 + \frac{1}{2}, s + \frac{1}{2}, s - \frac{1}{2}; \uparrow, 0 | f_{N-1,1\downarrow}^\dagger f_{N,1\downarrow} | j_1 - \frac{1}{2}, j_1 - \frac{1}{2}, j_2 + \frac{1}{2}, j_2 + \frac{1}{2}, s, s; \uparrow\downarrow, 0 \rangle_N +$$

$$+ (-1)^N \sqrt{\frac{2s+1}{2s+2}} \sqrt{\frac{1}{2j_2+2}} \sqrt{\frac{1}{2j_2+2}}.$$

$$\cdot \langle j_1, j_1, j_2 + \frac{1}{2}, j_2 - \frac{1}{2}, s + \frac{1}{2}, s + \frac{1}{2}; \downarrow, \uparrow\downarrow | f_{N-1,1\uparrow}^\dagger f_{N,1\uparrow} | j_1 - \frac{1}{2}, j_1 - \frac{1}{2}, j_2 + \frac{1}{2}, j_2 - \frac{1}{2}, s, s; \uparrow\downarrow, \uparrow\downarrow \rangle_N +$$

$$+ (-1)^N \sqrt{\frac{2s+1}{2s+2}} \sqrt{\frac{2j_2+1}{2j_2+2}} \sqrt{\frac{2j_2+1}{2j_2+2}}.$$

$$\cdot \langle j_1, j_1, j_2 + \frac{1}{2}, j_2 + \frac{1}{2}, s + \frac{1}{2}, s + \frac{1}{2}; \downarrow, 0 | f_{N-1,1\uparrow}^\dagger f_{N,1\uparrow} | j_1 - \frac{1}{2}, j_1 - \frac{1}{2}, j_2 + \frac{1}{2}, j_2 + \frac{1}{2}, s, s; \uparrow\downarrow, 0 \rangle_N$$

c) Contamos o número de operadores $f_N^\dagger$ à direita do operador $f_{N-1}^\dagger$ (lembrando que $\uparrow$ ou $\downarrow$ representa $f_{N\uparrow}^\dagger |\emptyset\rangle$ ou $f_{N\downarrow}^\dagger |\emptyset\rangle$) ou o número de operadores f_N à esquerda do operador $f_{N-1}^\dagger$ (lembre que $\uparrow$ ou $\downarrow$ representa $\langle\emptyset| f_{N\uparrow}$ ou $\langle\emptyset| f_{N\downarrow}$). Esses números são diferentes, mas o que importa é que ambos são pares ou ímpares. Coloque (-1) elevado a esse número

na resposta $((-1)^x)$ e separe os subespaços ($\langle \rangle_{N-1} \otimes \langle \rangle_N$ onde $\otimes$ simboliza apenas o produto entre os dois estados)

$$\begin{aligned}
& \langle 12 | H_I | 4 \rangle_N = \\
& = -(-1)^N \sqrt{\frac{1}{2s+2}} \frac{1}{2j_2+2} \cdot \\
& \cdot \left\langle j_1, j_1, j_2 + \frac{1}{2}, j_2 - \frac{1}{2}, s + \frac{1}{2}, s - \frac{1}{2} \left| f_{N-1,1\downarrow}^\dagger \right| j_1 - \frac{1}{2}, j_1 - \frac{1}{2}, j_2 + \frac{1}{2}, j_2 - \frac{1}{2}, s, s \right\rangle_{N-1} \otimes \\
& \otimes \langle \uparrow, \uparrow\downarrow; \emptyset | f_{N,1\downarrow} | \emptyset; \uparrow\downarrow, \uparrow\downarrow \rangle_N (-1)^3 - \\
& - (-1)^N \sqrt{\frac{1}{2s+2}} \frac{2j_2+1}{2j_2+2} \cdot \\
& \cdot \left\langle j_1, j_1, j_2 + \frac{1}{2}, j_2 + \frac{1}{2}, s + \frac{1}{2}, s - \frac{1}{2} \left| f_{N-1,1\downarrow}^\dagger \right| j_1 - \frac{1}{2}, j_1 - \frac{1}{2}, j_2 + \frac{1}{2}, j_2 + \frac{1}{2}, s, s \right\rangle_{N-1} \otimes \\
& \otimes \langle \uparrow, 0; \emptyset | f_{N,1\downarrow} | \emptyset; \uparrow\downarrow, 0 \rangle_N (-1)^1 + \\
& + (-1)^N \sqrt{\frac{2s+1}{2s+2}} \frac{1}{2j_2+2} \cdot \\
& \cdot \left\langle j_1, j_1, j_2 + \frac{1}{2}, j_2 - \frac{1}{2}, s + \frac{1}{2}, s + \frac{1}{2} \left| f_{N-1,1\uparrow}^\dagger \right| j_1 - \frac{1}{2}, j_1 - \frac{1}{2}, j_2 + \frac{1}{2}, j_2 - \frac{1}{2}, s, s \right\rangle_{N-1} \otimes \\
& \otimes \langle \downarrow, \uparrow\downarrow; \emptyset | f_{N,1\uparrow} | \emptyset; \uparrow\downarrow, \uparrow\downarrow \rangle_N (-1)^3 + \\
& + (-1)^N \sqrt{\frac{2s+1}{2s+2}} \frac{2j_2+1}{2j_2+2} \cdot \\
& \cdot \left\langle j_1, j_1, j_2 + \frac{1}{2}, j_2 + \frac{1}{2}, s + \frac{1}{2}, s + \frac{1}{2} \left| f_{N-1,1\uparrow}^\dagger \right| j_1 - \frac{1}{2}, j_1 - \frac{1}{2}, j_2 + \frac{1}{2}, j_2 + \frac{1}{2}, s, s \right\rangle_{N-1} \otimes \\
& \otimes \langle \downarrow, 0; \emptyset | f_{N,1\uparrow} | \emptyset; \uparrow\downarrow, 0 \rangle_N (-1)^1
\end{aligned}$$

d) Resolvemos o subespaço $\langle \rangle_N$ (o resultado pode ser +1 ou -1). A resposta é o sinal de $(-1)^x$ vezes o sinal de $\langle \rangle_N$ vezes o subespaço $\langle \rangle_{N-1}$. Este por sua vez é calculado usando o Teorema de Wigner-Eckart 3.29 - Tabela 2³ de Condon and Odabasi (pg.149) para adicionar spin 1 [45] e Tabela 1³ (pg. 149) para adicionar spin e carga axial 1/2.

$$\begin{aligned}
& \langle 12 | H_I | 4 \rangle_N = \\
& (-1)^N \left\{ -\sqrt{\frac{1}{2s+2}} \frac{1}{2j_2+2} \left\langle j_1 - \frac{1}{2}, j_1 - \frac{1}{2}; \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \mid j_1, j_1 \right\rangle \left\langle s, s; \frac{1}{2}, \frac{-1}{2} \mid s + \frac{1}{2}, s - \frac{1}{2} \right\rangle (-1) (-1)^3 - \right. \\
& -\sqrt{\frac{1}{2s+2}} \frac{2j_2+1}{2j_2+2} \left\langle j_1 - \frac{1}{2}, j_1 - \frac{1}{2}; \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \mid j_1, j_1 \right\rangle \left\langle s, s; \frac{1}{2}, \frac{-1}{2} \mid s + \frac{1}{2}, s - \frac{1}{2} \right\rangle (-1) (-1)^1 + \\
& +\sqrt{\frac{2s+1}{2s+2}} \frac{1}{2j_2+2} \left\langle j_1 - \frac{1}{2}, j_1 - \frac{1}{2}; \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \mid j_1, j_1 \right\rangle \left\langle s, s; \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \mid s + \frac{1}{2}, s + \frac{1}{2} \right\rangle (+1) (-1)^3 + \\
& +\sqrt{\frac{2s+1}{2s+2}} \frac{2j_2+1}{2j_2+2} \left\langle j_1 - \frac{1}{2}, j_1 - \frac{1}{2}; \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \mid j_1, j_1 \right\rangle \left\langle s, s; \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \mid s + \frac{1}{2}, s + \frac{1}{2} \right\rangle (+1) (-1)^1 \Big\} \\
& \cdot \left\langle j_1, j_2 + \frac{1}{2}, s + \frac{1}{2} \mid f_{N-1,1}^\dagger \mid j_1 - \frac{1}{2}, j_2 + \frac{1}{2}, s \right\rangle_{N-1} \\
& = \\
& (-1)^N \left\{ -\sqrt{\frac{1}{2s+2}} \frac{1}{2j_2+2} \cdot 1 \cdot \sqrt{\frac{1}{2s+1}} - \sqrt{\frac{1}{2s+2}} \frac{2j_2+1}{2j_2+2} \cdot 1 \cdot \sqrt{\frac{1}{2s+1}} - \sqrt{\frac{2s+1}{2s+2}} \frac{1}{2j_2+2} \cdot 1 \cdot 1 - \sqrt{\frac{2s+1}{2s+2}} \frac{2j_2+1}{2j_2+2} \cdot 1 \cdot 1 \right\} \cdot \\
& \cdot \left\langle j_1, j_2 + \frac{1}{2}, s + \frac{1}{2} \mid f_{N-1,1}^\dagger \mid j_1 - \frac{1}{2}, j_2 + \frac{1}{2}, s \right\rangle_{N-1} = \\
& = -(-1)^N \left\{ \sqrt{\frac{1}{2s+2}} \frac{1}{2j_2+2} \sqrt{\frac{1}{2s+1}} + \sqrt{\frac{1}{2s+2}} \frac{2j_2+1}{2j_2+2} \sqrt{\frac{1}{2s+1}} + \sqrt{\frac{2s+1}{2s+2}} \frac{1}{2j_2+2} + \sqrt{\frac{2s+1}{2s+2}} \frac{2j_2+1}{2j_2+2} \right\} \cdot \\
& \cdot \left\langle j_1, j_2 + \frac{1}{2}, s + \frac{1}{2} \mid f_{N-1,1}^\dagger \mid j_1 - \frac{1}{2}, j_2 + \frac{1}{2}, s \right\rangle_{N-1} = \\
& = -(-1)^N \frac{1}{2j_2+2} \left\{ \sqrt{\frac{1}{2s+2}} \sqrt{\frac{1}{2s+1}} + \sqrt{\frac{1}{2s+2}} (2j_2+1) \sqrt{\frac{1}{2s+1}} + \sqrt{\frac{2s+1}{2s+2}} + \sqrt{\frac{2s+1}{2s+2}} (2j_2+1) \right\} \cdot \\
& \cdot \left\langle j_1, j_2 + \frac{1}{2}, s + \frac{1}{2} \mid f_{N-1,1}^\dagger \mid j_1 - \frac{1}{2}, j_2 + \frac{1}{2}, s \right\rangle_{N-1} \\
& = -(-1)^N \frac{1}{2j_2+2} \left\{ \sqrt{\frac{1}{2s+2}} \sqrt{\frac{1}{2s+1}} (2j_2+2) + \sqrt{\frac{2s+1}{2s+2}} (2j_2+2) \right\} \cdot \\
& \cdot \left\langle j_1, j_2 + \frac{1}{2}, s + \frac{1}{2} \mid f_{N-1,1}^\dagger \mid j_1 - \frac{1}{2}, j_2 + \frac{1}{2}, s \right\rangle_{N-1} \\
& = -(-1)^N \left\{ \sqrt{\frac{1}{2s+2}} \sqrt{\frac{1}{2s+1}} + \sqrt{\frac{2s+1}{2s+2}} \right\} \left\langle j_1, j_2 + \frac{1}{2}, s + \frac{1}{2} \mid f_{N-1,1}^\dagger \mid j_1 - \frac{1}{2}, j_2 + \frac{1}{2}, s \right\rangle_{N-1} \\
& \langle 12 | H_I | 4 \rangle_N = -(-1)^N \sqrt{\frac{2s+2}{2s+1}} \left\langle j_1, j_2 + \frac{1}{2}, s + \frac{1}{2} \mid f_{N-1,1}^\dagger \mid j_1 - \frac{1}{2}, j_2 + \frac{1}{2}, s \right\rangle_{N-1}
\end{aligned}$$

Elementos de Matriz

A seguir listamos todos os 40 elementos de matriz que podem resultar em valor não nulo (a menos da constante $\xi_{N-1,\alpha}^z$).

$$\begin{aligned}
1 - \langle 2|H_N|1 \rangle &= (-1)^N \sqrt{\frac{2s}{2s+1}} \langle j_1 - 1/2, j_2, s - 1/2 || 2 || j_1 - 1/2, j_2 - 1/2, s \rangle \\
2 - \langle 3|H_N|1 \rangle &= -(-1)^N \sqrt{\frac{2s+2}{2s+1}} \langle j_1 - 1/2, j_2, s + 1/2 || 2 || j_1 - 1/2, j_2 - 1/2, s \rangle \\
3 - \langle 4|H_N|2 \rangle &= \sqrt{\frac{2j_2+2}{2j_2+1}} \langle j_1 - 1/2, j_2 + 1/2, s || 2 || j_1 - 1/2, j_2, s - 1/2 \rangle \\
4 - \langle 4|H_N|3 \rangle &= \sqrt{\frac{2j_2+2}{2j_2+1}} \langle j_1 - 1/2, j_2 + 1/2, s || 2 || j_1 - 1/2, j_2, s + 1/2 \rangle \\
5 - \langle 5|H_N|1 \rangle &= (-1)^N \sqrt{\frac{2s}{2s+1}} \langle j_1, j_2 - 1/2, s - 1/2 || 1 || j_1 - 1/2, j_2 - 1/2, s \rangle \\
6 - \langle 6|H_N|1 \rangle &= -(-1)^N \sqrt{\frac{2s+2}{2s+1}} \langle j_1, j_2 - 1/2, s + 1/2 || 1 || j_1 - 1/2, j_2 - 1/2, s \rangle \\
7 - \langle 7|H_N|2 \rangle &= -(-1)^N \sqrt{\frac{2s-1}{2s}} \langle j_1, j_2, s - 1 || 1 || j_1 - 1/2, j_2, s - 1/2 \rangle \\
8 - \langle 7|H_N|5 \rangle &= (-1)^N \sqrt{\frac{2s-1}{2s}} \langle j_1, j_2, s - 1 || 2 || j_1, j_2 - 1/2, s - 1/2 \rangle \\
9 - \langle 8|H_N|2 \rangle &= -\frac{(-1)^N}{\sqrt{2}} \langle j_1, j_2, s || 1 || j_1 - 1/2, j_2, s - 1/2 \rangle \\
10 - \langle 8|H_N|3 \rangle &= -\frac{(-1)^N}{\sqrt{2}} \langle j_1, j_2, s || 1 || j_1 - 1/2, j_2, s + 1/2 \rangle \\
11 - \langle 8|H_N|5 \rangle &= -\frac{(-1)^N}{\sqrt{2}} \langle j_1, j_2, s || 2 || j_1, j_2 - 1/2, s - 1/2 \rangle \\
12 - \langle 8|H_N|6 \rangle &= -\frac{(-1)^N}{\sqrt{2}} \langle j_1, j_2, s || 2 || j_1, j_2 - 1/2, s + 1/2 \rangle \\
13 - \langle 9|H_N|2 \rangle &= (-1)^N \sqrt{\frac{s+1}{2s}} \langle j_1, j_2, s || 1 || j_1 - 1/2, j_2, s - 1/2 \rangle \\
14 - \langle 9|H_N|3 \rangle &= -(-1)^N \sqrt{\frac{s}{2s+2}} \langle j_1, j_2, s || 1 || j_1 - 1/2, j_2, s + 1/2 \rangle \\
15 - \langle 9|H_N|5 \rangle &= -(-1)^N \sqrt{\frac{s+1}{2s}} \langle j_1, j_2, s || 2 || j_1, j_2 - 1/2, s - 1/2 \rangle \\
16 - \langle 9|H_N|6 \rangle &= (-1)^N \sqrt{\frac{s}{2s+2}} \langle j_1, j_2, s || 2 || j_1, j_2 - 1/2, s + 1/2 \rangle \\
17 - \langle 10|H_N|3 \rangle &= (-1)^N \sqrt{\frac{2s+3}{2s+2}} \langle j_1, j_2, s + 1 || 1 || j_1 - 1/2, j_2, s + 1/2 \rangle \\
18 - \langle 10|H_N|6 \rangle &= -(-1)^N \sqrt{\frac{2s+3}{2s+2}} \langle j_1, j_2, s + 1 || 2 || j_1, j_2 - 1/2, s + 1/2 \rangle
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
19 - \langle 11|H_N|4 \rangle &= (-1)^N \sqrt{\frac{2s}{2s+1}} \langle j_1, j_2 + 1/2, s - 1/2 || 1 || j_1 - 1/2, j_2 + 1/2, s \rangle \\
20 - \langle 11|H_N|7 \rangle &= \sqrt{\frac{2j_2+2}{2j_2+1}} \langle j_1, j_2 + 1/2, s - 1/2 || 2 || j_1, j_2, s - 1 \rangle \\
21 - \langle 11|H_N|8 \rangle &= \sqrt{\frac{s}{2s+1}} \sqrt{\frac{2j_2+2}{2j_2+1}} \langle j_1, j_2 + 1/2, s - 1/2 || 2 || j_1, j_2, s \rangle \\
22 - \langle 11|H_N|9 \rangle &= \sqrt{\frac{s+1}{2s+1}} \sqrt{\frac{2j_2+2}{2j_2+1}} \langle j_1, j_2 + 1/2, s - 1/2 || 2 || j_1, j_2, s \rangle \\
23 - \langle 12|H_N|4 \rangle &= -(-1)^N \sqrt{\frac{2s+2}{2s+1}} \langle j_1, j_2 + 1/2, s + 1/2 || 1 || j_1 - 1/2, j_2 + 1/2, s \rangle \\
24 - \langle 12|H_N|8 \rangle &= -\sqrt{\frac{j_2+1}{2j_2+1}} \sqrt{\frac{2s+2}{2s+1}} \langle j_1, j_2 + 1/2, s + 1/2 || 2 || j_1, j_2, s \rangle \\
25 - \langle 12|H_N|9 \rangle &= \sqrt{\frac{s}{2s+1}} \sqrt{\frac{2j_2+2}{2j_2+1}} \langle j_1, j_2 + 1/2, s + 1/2 || 2 || j_1, j_2, s \rangle \\
26 - \langle 12|H_N|10 \rangle &= \sqrt{\frac{2j_2+2}{2j_2+1}} \langle j_1, j_2 + 1/2, s + 1/2 || 2 || j_1, j_2, s + 1 \rangle \\
27 - \langle 13|H_N|5 \rangle &= \sqrt{\frac{2j_1+2}{2j_1+1}} \langle j_1 + 1/2, j_2 - 1/2, s || 1 || j_1, j_2 - 1/2, s - 1/2 \rangle \\
28 - \langle 13|H_N|6 \rangle &= \sqrt{\frac{2j_1+2}{2j_1+1}} \langle j_1 + 1/2, j_2 - 1/2, s || 1 || j_1, j_2 - 1/2, s + 1/2 \rangle \\
29 - \langle 14|H_N|7 \rangle &= -\sqrt{\frac{2j_1+2}{2j_1+1}} \langle j_1 + 1/2, j_2, s - 1/2 || 1 || j_1, j_2, s - 1 \rangle \\
30 - \langle 14|H_N|8 \rangle &= \sqrt{\frac{s}{2s+1}} \sqrt{\frac{2j_1+2}{2j_1+1}} \langle j_1 + 1/2, j_2, s - 1/2 || 1 || j_1, j_2, s \rangle \\
31 - \langle 14|H_N|9 \rangle &= -\sqrt{\frac{s+1}{2s+1}} \sqrt{\frac{2j_1+2}{2j_1+1}} \langle j_1 + 1/2, j_2, s - 1/2 || 1 || j_1, j_2, s \rangle \\
32 - \langle 14|H_N|13 \rangle &= (-1)^N \sqrt{\frac{2s}{2s+1}} \langle j_1 + 1/2, j_2, s - 1/2 || 2 || j_1 + 1/2, j_2 - 1/2, s \rangle \\
33 - \langle 15|H_N|8 \rangle &= -\sqrt{\frac{2s+2}{2s+1}} \sqrt{\frac{j_1+1}{2j_1+1}} \langle j_1 + 1/2, j_2, s + 1/2 || 1 || j_1, j_2, s \rangle \\
34 - \langle 15|H_N|9 \rangle &= -\sqrt{\frac{s}{2s+1}} \sqrt{\frac{2j_1+2}{2j_1+1}} \langle j_1 + 1/2, j_2, s + 1/2 || 1 || j_1, j_2, s \rangle \\
35 - \langle 15|H_N|10 \rangle &= -\sqrt{\frac{2j_1+2}{2j_1+1}} \langle j_1 + 1/2, j_2, s + 1/2 || 1 || j_1, j_2, s + 1 \rangle \\
36 - \langle 15|H_N|13 \rangle &= -(-1)^N \sqrt{\frac{2s+2}{2s+1}} \langle j_1 + 1/2, j_2, s + 1/2 || 2 || j_1 + 1/2, j_2 - 1/2, s \rangle \\
37 - \langle 16|H_N|11 \rangle &= \sqrt{\frac{2j_1+2}{2j_1+1}} \langle j_1 + 1/2, j_2 + 1/2, s || 1 || j_1, j_2 + 1/2, s - 1/2 \rangle
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
38 - \langle 16|H_N|12\rangle &= \sqrt{\frac{2j_1+2}{2j_1+1}}\langle j_1+1/2, j_2+1/2, s||1||j_1, j_2+1/2, s+1/2\rangle \\
39 - \langle 16|H_N|14\rangle &= \sqrt{\frac{2j_2+2}{2j_2+1}}\langle j_1+1/2, j_2+1/2, s||2||j_1+1/2, j_2, s-1/2\rangle \\
40 - \langle 16|H_N|15\rangle &= \sqrt{\frac{2j_2+2}{2j_2+1}}\langle j_1+1/2, j_2+1/2, s||2||j_1+1/2, j_2, s+1/2\rangle
\end{aligned}$$

Apêndice C

Construção dos Invariantes

No Apêndice B temos todos os elementos de matriz de H_N . Eles têm a forma genérica

$$\langle tipo' | H_N | tipo \rangle_N = A \langle j_1, j_2, s | \| j'_1, j'_2, s' \rangle_{N-1} \quad (C.1)$$

onde A é um coeficiente. O termo $\langle j_1, j_2, s | \| j'_1, j'_2, s' \rangle_{N-1}$ é o invariante. O vetor bra ou vetor ket do invariante representa um *sub-espço* da interação $N - 1$: $\| j'_1, j'_2, s' \rangle_{N-1}$ representa o sub-espço j'_1, j'_2, s' isto é, o conjunto de todos os auto-estados da interação $N - 1$ que possuem estes números quânticos. Quando quisermos nos referir a um desses auto-estados especificamente, usamos a notação $\| j'_1, j'_2, s', l \rangle$ (l -ésimo auto-estado do sub-espço j'_1, j'_2, s').

Cada auto-estado é combinação de vários vetores da base, por isso o termo $\langle \| \| \rangle_{N-1}$ da Eq. C.1 representa na verdade os vários invariantes entre vetores, que podemos identificar pela expressão

$$\langle j_1, j_2, s, r, t | \| j'_1, j'_2, s', r', t' \rangle_{N-1} , \quad (C.2)$$

onde r é um índice de contagem e t representa o tipo pelo qual o vetor foi construído ($t = 1, 2, \dots, 16$).

Vamos escolher um elemento de matriz qualquer para explicar o cálculo do termo

invariante. Do Apêndice B escolhemos o elemento de matriz

$$\langle 2 | H_N | 1 \rangle_N = (-1)^N \sqrt{\frac{2s}{2s+1}} \left\langle j_1 - \frac{1}{2}, j_2, s - \frac{1}{2} \left\| f_{N2}^\dagger \right\| j_1 - \frac{1}{2}, j_2 - \frac{1}{2}, s \right\rangle_{N-1}. \quad (\text{C.3})$$

A relação entre os números quânticos do bra e do ket do invariante depende apenas da diferença entre eles. Por isso, podemos rearranjar o invariante da seguinte forma:

$$\left\langle j_1 - \frac{1}{2}, j_2, s - \frac{1}{2} \left\| f_{N2}^\dagger \right\| j_1 - \frac{1}{2}, j_2 - \frac{1}{2}, s \right\rangle_{N-1} \equiv \left\langle j_1, j_2 + \frac{1}{2}, s - \frac{1}{2} \left\| f_{N2}^\dagger \right\| j_1, j_2, s \right\rangle_{N-1}. \quad (\text{C.4})$$

O termo C.4 representa a combinação de dois sub-espacos diferentes (S_1 e S_2) dentro da mesma iteração $N - 1$. Como desejamos um elemento de matriz da iteração N , já conhecemos os auto-estados da iteração $N - 1$. Cada auto-estado de S_1 tem que ser combinado com todos os outros auto-estados de S_2 .

O auto-estado é uma combinação linear de vetores da base, isto é,

$$|j_1, j_2, s, l\rangle_{N-1} = \sum_{r,t} U_{j_1, j_2, s, l}(r, t) |j_1, j_2, s, r, t\rangle_{N-1}$$

onde r é um índice de contagem, t representa o tipo pelo qual esse vetor foi construído ($t = 1, 2, \dots, 16$) e $U_{j_1, j_2, s, l}$ são coeficientes da matriz dos autovetores obtidos da diagonalização H_{N-1} .

Por isso o termo $\langle || \quad || \rangle_{N-1}$ indica na verdade vários invariantes entre vetores da base, sendo que esses invariantes podem ser representados melhor pela expressão

$$\langle j'_1, j'_2, s', r', t' || \quad || j_1, j_2, s, r, t \rangle_{N-1} \quad (\text{C.5})$$

Os coeficientes $U_{j_1, j_2, s, l}(r, t)$ já foram determinados durante a diagonalização do Hamiltoniano H_{N-1} .

A determinação do invariante representado pela Eq. C.5 é feita de uma maneira indireta:

i) Escolhemos de um elemento de matriz conveniente, ou seja, aquele que em que os parâmetros $r = r'$, $j'_{1,2} = j_{1,2} \pm \frac{1}{2}$, $s' = s \pm \frac{1}{2}$ e t, t' devem estar relacionados como na Tabela 3.3.

ii) Resolvemos este elemento de matriz usando o Teorema de Wigner-Eckart (Eq. 3.29).

Isso pode parecer um contra-senso, já que usamos um elemento de matriz para conhecer o invariante para, junto com outros invariantes, determinar o elemento de matriz Eq. C.3. Acontece que a Eq. C.3 foi obtida usando a transformação do GRN (expressão 3.32) que relaciona duas iterações diferentes (N e $N - 1$). Já o invariante Eq. C.5 é encontrado quando se usa Teorema de Wigner-Eckart em um elemento de matriz conveniente, sendo que tanto o invariante quanto o elemento de matriz nessa equação são da mesma iteração ($N - 1$).

Dessa forma, o invariante entre vetores da base de H_{N-1} é determinado pela expressão:

$$\langle j'_1, j'_2, s', r', t' | j_1, j_2, s, r, t \rangle_{N-1} = c_1 c_2 c_s \langle j'_1, j'_2, s', r', t' | j_1, j_2, s, r, t \rangle_{N-1} \quad (\text{C.6})$$

c_1 , c_2 e c_s são os coeficientes de Clebsh-Gordan para carga axial 1, carga axial 2 e spin (Tabela 2³ e Tabela 1³ de Condon and Odabasi [45]). Salientamos que na Eq. C.6 tanto o elemento de matriz quanto o invariante são da mesma iteração. O termo $\langle j'_1, j'_2, s', r', t' | j_1, j_2, s, r, t \rangle_{N-1}$ é encontrada de maneira direta (como mostraremos no exemplo a seguir).

Conforme mencionado no Capítulo 3, para tornar o cálculo numérico mais eficiente, em cada iteração se calcula os invariantes para a iteração seguinte. Assim, logo após a diagonalização do Hamiltoniano H_{N-1} esses invariantes foram determinados para serem usados em H_N .

A seguir fazemos um exemplo de cálculo de invariante da iteração N .

$$\text{Exemplo: } \langle j_1, j_2 + \frac{1}{2}, s - \frac{1}{2}, r', 1 | f_{N2}^\dagger | j_1, j_2, s, r, 2 \rangle_N = ?$$

Vamos encontrar esse invariante calculando o elemento de matriz

$$\left\langle j_1, j'_{1z}, j_2 + \frac{1}{2}, j'_{2z}, s - \frac{1}{2}, s'_z, r', 1 \left| f_{Ni\mu}^\dagger \right| j_1, j_{1z}, j_2, j_{2z}, s, s_z, r, 2 \right\rangle_N.$$

Os elementos de matriz não dependem de $j_{1,2z}$ ou de s_z , por isso fazemos $j'_{1z} = j_1$,

$$j'_{2z} = j_2 + \frac{1}{2}, s'_z = s - \frac{1}{2}, j_{1z} = j_1, j_{2z} = j_2 \text{ e } s_z = s. \text{ Também fazemos } r' = r.$$

$$\begin{aligned} & \left\langle j_1, j'_{1z}, j_2 + \frac{1}{2}, j'_{2z}, s - \frac{1}{2}, s'_z, r', 1 \left| f_{Ni\mu}^\dagger \right| j_1, j_{1z}, j_1, j_{1z}, s, s_z, r, 2 \right\rangle_N = \\ & = \left\langle j_1, j_1, j_2 + \frac{1}{2}, j_2 + \frac{1}{2}, s - \frac{1}{2}, s - \frac{1}{2}, r, 1 \left| f_{Ni\mu}^\dagger \right| j_1, j_1, j_2, j_2, s, s, r, 2 \right\rangle_N \end{aligned}$$

Usando o Teorema de Wigner-Eckart

$$\begin{aligned} & \left\langle j_1, j_1, j_2 + \frac{1}{2}, j_2 + \frac{1}{2}, s - \frac{1}{2}, s - \frac{1}{2}, r', 1 \left| f_{Ni\mu}^\dagger \right| j_1, j_1, j_2, j_2, s, s, r, 2 \right\rangle_N = \\ & \left\langle j_2, j_2; \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \left| j_2 + \frac{1}{2}, j_2 + \frac{1}{2} \right\rangle \left\langle s, s; \frac{1}{2}, \mu \left| s - \frac{1}{2}, s - \frac{1}{2} \right\rangle \left\langle j_1, j_2 + \frac{1}{2}, s - \frac{1}{2}, r', 1 \left| f_{N2}^\dagger \right| j_1, j_2, s, r, 2 \right\rangle_N \right. \end{aligned}$$

Reescrevemos os kets do estado N

$$\begin{aligned} & |j_1, j_1, j_2, j_2, s, s, r, 2\rangle_N = (-1)^N \left| j_1 - \frac{1}{2}, j_1 - \frac{1}{2}, j_2, j_2, s - \frac{1}{2}, s - \frac{1}{2}; \uparrow\downarrow, \uparrow \right\rangle_N \text{ e} \\ & |j_1, j_1, j_2, j_2, s, s, r', 1\rangle_N = \left| j_1 - \frac{1}{2}, j_1 - \frac{1}{2}, j_2 - \frac{1}{2}, j_2 - \frac{1}{2}, s, s; \uparrow\downarrow, \uparrow\downarrow \right\rangle_N, \text{ então} \\ & \left| j_1, j_1, j_2 + \frac{1}{2}, j_2 + \frac{1}{2}, s - \frac{1}{2}, s - \frac{1}{2}, r', 1 \right\rangle_N = \\ & = \left| j_1 - \frac{1}{2}, j_1 - \frac{1}{2}, j_2, j_2, s - \frac{1}{2}, s - \frac{1}{2}; \uparrow\downarrow, \uparrow\downarrow \right\rangle_N \end{aligned}$$

A expressão de Wigner-Eckart fica

$$\begin{aligned} & (-1)^N \left\langle j_1 - \frac{1}{2}, j_1 - \frac{1}{2}, j_2, j_2, s - \frac{1}{2}, s - \frac{1}{2}; \uparrow\downarrow, \uparrow\downarrow \left| f_{Ni\mu}^\dagger \right| j_1 - \frac{1}{2}, j_1 - \frac{1}{2}, j_2, j_2, s - \frac{1}{2}, s - \frac{1}{2}; \uparrow\downarrow, \uparrow \right\rangle_N = \\ & \left\langle j_2, j_2; \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \left| j_2 + \frac{1}{2}, j_2 + \frac{1}{2} \right\rangle \left\langle s, s; \frac{1}{2}, \mu \left| s - \frac{1}{2}, s - \frac{1}{2} \right\rangle \left\langle j_1, j_2 + \frac{1}{2}, s - \frac{1}{2}, r', 1 \left| f_{N2}^\dagger \right| j_1, j_2, s, r, 2 \right\rangle_N \right. \end{aligned}$$

Escolhemos canal 2 ($i = 2$) e $\mu = -\frac{1}{2}$ ($\downarrow$) e isolamos o termo invariante

$$\begin{aligned} & \left\langle j_1, j_2 + \frac{1}{2}, s - \frac{1}{2}, r', 1 \left| f_{N2}^\dagger \right| j_1, j_2, s, r, 2 \right\rangle_N = \\ & = (-1)^N \frac{\left\langle j_1 - \frac{1}{2}, j_1 - \frac{1}{2}, j_2, j_2, s - \frac{1}{2}, s - \frac{1}{2}; \uparrow\downarrow, \uparrow\downarrow \left| f_{N2\downarrow}^\dagger \right| j_1 - \frac{1}{2}, j_1 - \frac{1}{2}, j_2, j_2, s - \frac{1}{2}, s - \frac{1}{2}; \uparrow\downarrow, \uparrow \right\rangle_N}{\left\langle j_2, j_2; \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \left| j_2 + \frac{1}{2}, j_2 + \frac{1}{2} \right\rangle \left\langle s, s; \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \left| s - \frac{1}{2}, s - \frac{1}{2} \right\rangle} \right. \end{aligned}$$

Em tabelas de coeficientes de Clebsh-Gordan encontramos

$$\begin{aligned} & \left\langle j_2, j_2; \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \left| j_2 + \frac{1}{2}, j_2 + \frac{1}{2} \right\rangle = \sqrt{\frac{j_2 + j_2 + \frac{1}{2} + \frac{1}{2}}{2j_2 + 1}} = 1 \\ & \left\langle s, s; \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \left| s - \frac{1}{2}, s - \frac{1}{2} \right\rangle = \sqrt{\frac{s + s - \frac{1}{2} + \frac{1}{2}}{2s + 1}} = \sqrt{\frac{2s}{2s + 1}} \end{aligned}$$

Resolvendo $\left\langle \left| f_{N2\downarrow}^\dagger \right| \right\rangle$ (ver Apêndice B)

$$\begin{aligned} & \left\langle j_1 - \frac{1}{2}, j_1 - \frac{1}{2}, j_2, j_2, s - \frac{1}{2}, s - \frac{1}{2}; \uparrow\downarrow, \uparrow\downarrow \left| f_{N2\downarrow}^\dagger \right| j_1 - \frac{1}{2}, j_1 - \frac{1}{2}, j_2, j_2, s - \frac{1}{2}, s - \frac{1}{2}; \uparrow\downarrow, \uparrow \right\rangle_N = \\ & = \left\langle j_1 - \frac{1}{2}, j_1 - \frac{1}{2}, j_2, j_2, s - \frac{1}{2}, s - \frac{1}{2} \left| j_1 - \frac{1}{2}, j_1 - \frac{1}{2}, j_2, j_2, s - \frac{1}{2}, s - \frac{1}{2} \right\rangle_{N-1} \otimes \right. \\ & \otimes \left\langle \uparrow\downarrow, \uparrow\downarrow; \emptyset \left| f_{N2\downarrow}^\dagger \right| \emptyset; \uparrow\downarrow, \uparrow \right\rangle_N (-1)^0 \end{aligned}$$

Observação: foi colocado $(-1)^0$ pois não há operador f_{N-1} para comutar com $f_{N2\downarrow}^\dagger$.

$$\left\langle j - \frac{1}{2}, j - \frac{1}{2}, s - \frac{1}{2}, s - \frac{1}{2}; \uparrow\downarrow, \uparrow\downarrow \left| f_{N2\downarrow}^\dagger \right| j - \frac{1}{2}, j - \frac{1}{2}, s - \frac{1}{2}, s - \frac{1}{2}; \uparrow\downarrow, \uparrow \right\rangle_N = 1(-1) = -1$$

Então ,

$$\langle j_1, j_2 + \frac{1}{2}, s - \frac{1}{2}, r', 1 | | f_{N2}^\dagger | | j_1, j_2, s, r, 2 \rangle_N = (-1)^N \sqrt{\frac{2s+1}{2s}} (-1) = -(-1)^N \sqrt{\frac{2s+1}{2s}}$$

Segue as listas dos invariantes de auto-estados da iteração N :

Lista de Invariantes do Canal 1 $\langle | | f_{N,1}^\dagger | | \rangle_N$

$$\begin{aligned} 1 - \langle j_1, j_2, s, 1 | | 1 | | j_1 - \frac{1}{2}, j_2, s + \frac{1}{2}, 5 \rangle &= -(-1)^N \sqrt{\frac{2s+2}{2s+1}} \\ 2 - \langle j_1, j_2, s, 2 | | 1 | | j_1 - \frac{1}{2}, j_2, s + \frac{1}{2}, 7 \rangle &= -(-1)^N \sqrt{\frac{2s+2}{2s+1}} \\ 3 - \langle j_1, j_2, s, 3 | | 1 | | j_1 - \frac{1}{2}, j_2, s + \frac{1}{2}, 8 \rangle &= -(-1)^N \frac{1}{\sqrt{2}} \\ 4 - \langle j_1, j_2, s, 3 | | 1 | | j_1 - \frac{1}{2}, j_2, s + \frac{1}{2}, 9 \rangle &= -(-1)^N \sqrt{\frac{2s+3}{4s+2}} \\ 5 - \langle j_1, j_2, s, 4 | | 1 | | j_1 - \frac{1}{2}, j_2, s + \frac{1}{2}, 11 \rangle &= -(-1)^N \sqrt{\frac{2s+2}{2s+1}} \\ 6 - \langle j_1, j_2, s, 6 | | 1 | | j_1 - \frac{1}{2}, j_2, s + \frac{1}{2}, 13 \rangle &= \sqrt{\frac{2j_1}{2j_1+1}} \\ 7 - \langle j_1, j_2, s, 8 | | 1 | | j_1 - \frac{1}{2}, j_2, s + \frac{1}{2}, 14 \rangle &= -\frac{1}{2} \sqrt{\frac{4s+4}{2s+1}} \sqrt{\frac{2j_1}{2j_1+1}} \\ 8 - \langle j_1, j_2, s, 9 | | 1 | | j_1 - \frac{1}{2}, j_2, s + \frac{1}{2}, 14 \rangle &= \frac{1}{2} \sqrt{\frac{4s}{2s+1}} \sqrt{\frac{2j_1}{2j_1+1}} \\ 9 - \langle j_1, j_2, s, 10 | | 1 | | j_1 - \frac{1}{2}, j_2, s + \frac{1}{2}, 15 \rangle &= \sqrt{\frac{2j_1}{2j_1+1}} \\ 10 - \langle j_1, j_2, s, 12 | | 1 | | j_1 - \frac{1}{2}, j_2, s + \frac{1}{2}, 16 \rangle &= \sqrt{\frac{2j_1}{2j_1+1}} \\ 11 - \langle j_1, j_2, s, 1 | | 1 | | j_1 - \frac{1}{2}, j_2, s - \frac{1}{2}, 6 \rangle &= (-1)^N \sqrt{\frac{2s}{2s+1}} \\ 12 - \langle j_1, j_2, s, 2 | | 1 | | j_1 - \frac{1}{2}, j_2, s - \frac{1}{2}, 8 \rangle &= -\frac{(-1)^N}{\sqrt{2}} \\ 13 - \langle j_1, j_2, s, 2 | | 1 | | j_1 - \frac{1}{2}, j_2, s - \frac{1}{2}, 9 \rangle &= (-1)^N \sqrt{\frac{2s-1}{4s+2}} \\ 14 - \langle j_1, j_2, s, 3 | | 1 | | j_1 - \frac{1}{2}, j_2, s - \frac{1}{2}, 10 \rangle &= (-1)^N \sqrt{\frac{2s}{2s+1}} \\ 15 - \langle j_1, j_2, s, 4 | | 1 | | j_1 - \frac{1}{2}, j_2, s - \frac{1}{2}, 12 \rangle &= (-1)^N \sqrt{\frac{2s}{2s+1}} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
16 - \langle j_1, j_2, s, 5 || 1 || j_1 - \frac{1}{2}, j_2, s - \frac{1}{2}, 13 \rangle &= \sqrt{\frac{2j_1}{2j_1 + 1}} \\
17 - \langle j_1, j_2, s, 7 || 1 || j_1 - \frac{1}{2}, j_2, s - \frac{1}{2}, 14 \rangle &= \sqrt{\frac{2j_1}{2j_1 + 1}} \\
18 - \langle j_1, j_2, s, 8 || 1 || j_1 - \frac{1}{2}, j_2, s - \frac{1}{2}, 15 \rangle &= \sqrt{\frac{1}{2}} \sqrt{\frac{2s}{2s + 1}} \sqrt{\frac{2j_1}{2j_1 + 1}} \\
19 - \langle j_1, j_2, s, 9 || 1 || j_1 - \frac{1}{2}, j_2, s - \frac{1}{2}, 15 \rangle &= \sqrt{\frac{1}{2}} \sqrt{\frac{2s + 2}{2s + 1}} \sqrt{\frac{2j_1}{2j_1 + 1}} \\
20 - \langle j_1, j_2, s, 11 || 1 || j_1 - \frac{1}{2}, j_2, s - \frac{1}{2}, 16 \rangle &= \sqrt{\frac{2j_1}{2j_1 + 1}}
\end{aligned}$$

Lista de Invariantes do Canal 2 $\langle || f_{N,2}^\dagger || \rangle_N$

$$\begin{aligned}
1 - \langle j_1, j_2, s, 1 || 2 || j_1, j_2 - \frac{1}{2}, s + \frac{1}{2}, 2 \rangle &= -(-1)^N \sqrt{\frac{2s + 2}{2s + 1}} \\
2 - \langle j_1, j_2, s, 3 || 2 || j_1, j_2 - \frac{1}{2}, s + \frac{1}{2}, 4 \rangle &= \sqrt{\frac{2j_2}{2j_2 + 1}} \\
3 - \langle j_1, j_2, s, 5 || 2 || j_1, j_2 - \frac{1}{2}, s + \frac{1}{2}, 7 \rangle &= (-1)^N \sqrt{\frac{2s + 2}{2s + 1}} \\
4 - \langle j_1, j_2, s, 6 || 2 || j_1, j_2 - \frac{1}{2}, s + \frac{1}{2}, 8 \rangle &= -\frac{(-1)^N}{\sqrt{2}} \\
5 - \langle j_1, j_2, s, 6 || 2 || j_1, j_2 - \frac{1}{2}, s + \frac{1}{2}, 9 \rangle &= (-1)^N \sqrt{\frac{2s + 3}{4s + 2}} \\
6 - \langle j_1, j_2, s, 8, || 2 || j_1, j_2 - \frac{1}{2}, s + \frac{1}{2}, 11 \rangle &= -\frac{1}{2} \sqrt{\frac{4s + 4}{2s + 1}} \sqrt{\frac{2j_2}{2j_2 + 1}} \\
7 - \langle j_1, j_2, s, 9 || 2 || j_1, j_2 - \frac{1}{2}, s + \frac{1}{2}, 11 \rangle &= -\frac{1}{2} \sqrt{\frac{4s}{2s + 1}} \sqrt{\frac{2j_2}{2j_2 + 1}} \\
8 - \langle j_1, j_2, s, 10 || 2 || j_1, j_2 - \frac{1}{2}, s + \frac{1}{2}, 12 \rangle &= -\sqrt{\frac{2j_2}{2j_2 + 1}} \\
9 - \langle j_1, j_2, s, 13 || 2 || j_1, j_2 - \frac{1}{2}, s + \frac{1}{2}, 14 \rangle &= -(-1)^N \sqrt{\frac{2s + 2}{2s + 1}} \\
10 - \langle j_1, j_2, s, 15 || 2 || j_1, j_2 - \frac{1}{2}, s + \frac{1}{2}, 16 \rangle &= \sqrt{\frac{2j_2}{2j_2 + 1}} \\
11 - \langle j_1, j_2, s, 1 || 2 || j_1, j_2 - \frac{1}{2}, s - \frac{1}{2}, 3 \rangle &= (-1)^N \sqrt{\frac{2s}{2s + 1}} \\
12 - \langle j_1, j_2, s, 2 || 2 || j_1, j_2 - \frac{1}{2}, s - \frac{1}{2}, 4 \rangle &= \sqrt{\frac{2j_2}{2j_2 + 1}}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
13 - \langle j_1, j_2, s, 5 || 2 || j_1, j_2 - \frac{1}{2}, s - \frac{1}{2}, 8 \rangle &= -\frac{(-1)^N}{\sqrt{2}} \\
14 - \langle j_1, j_2, s, 5 || 2 || j_1, j_2 - \frac{1}{2}, s - \frac{1}{2}, 9 \rangle &= -(-1)^N \sqrt{\frac{2s-1}{4s+2}} \\
15 - \langle j_1, j_2, s, 6 || 2 || j_1, j_2 - \frac{1}{2}, s - \frac{1}{2}, 10 \rangle &= -(-1)^N \sqrt{\frac{2s}{2s+1}} \\
16 - \langle j_1, j_2, s, 7 || 2 || j_1, j_2 - \frac{1}{2}, s - \frac{1}{2}, 11 \rangle &= -\sqrt{\frac{2j_2}{2j_2+1}} \\
17 - \langle j_1, j_2, s, 8 || 2 || j_1, j_2 - \frac{1}{2}, s - \frac{1}{2}, 12 \rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{\frac{2s}{2s+1}} \sqrt{\frac{2j_2}{2j_2+1}} \\
18 - \langle j_1, j_2, s, 9 || 2 || j_1, j_2 - \frac{1}{2}, s - \frac{1}{2}, 12 \rangle &= -\sqrt{\frac{1}{2}} \sqrt{\frac{2s+2}{2s+1}} \sqrt{\frac{2j_2}{2j_2+1}} \\
19 - \langle j_1, j_2, s, 13 || 2 || j_1, j_2 - \frac{1}{2}, s - \frac{1}{2}, 15 \rangle &= (-1)^N \sqrt{\frac{2s}{2s+1}} \\
20 - \langle j_1, j_2, s, 14 || 2 || j_1, j_2 - \frac{1}{2}, s - \frac{1}{2}, 16 \rangle &= \sqrt{\frac{2j_2}{2j_2+1}}
\end{aligned}$$

Referências Bibliográficas

- [1] J. Kondo. Resistance Minimum in Dilute Magnetic Alloys. *Progress of Theoretical Physics*, **32**(01), 37, 1964.
- [2] P. Coleman; M. B. Maple; A. Millis. Proceedings of the Conference on Non-Fermi Liquid Behaviour in Metals, Santa Barbara, 1996. *J. Phys. Condens. Matter*, **8**, 1996.
- [3] E. W. Scheidt; T. Schreiner; K. Heuser; S. Koemer; G. R. Stewart. Low-temperature specific heat of UCu₅-xPdx: A test for non-Fermi-liquid theory. *Phys. Rev. B*, **58**(16), 1998.
- [4] M. C. Andrade; R. Chau; R. P. Dickey; N. R. Dilley; E. J. Freeman; D. A. Gajewski; M. B. Maple; R. Movshovich; A. H. Castro Neto; G. Castilha; B. A. Jones. Evidence for a Common Physical Description of a Non-Fermi-Liquid Behaviour in a Chemically Substituted f-Electron Systems. *Phys. Letters*, **81**(25), 5620, 1998.
- [5] E. Miranda; V. Dobrosavljevic; G. Kotliar. Disorder-Driven Non-Fermi-Liquid Behavior in Kondo Alloys. *Physical Review Letters*, **78**(2), 290, 1997.
- [6] R. Consiglio; M. A. Gusmão. Simplified Periodic Anderson Model: Exact solution in infinite dimensions. *Physical Review B*, **55**(11), 6825, 1997.
- [7] M. A. Continentino; G. M. Japiassu; A. Troper. Critical Approach to the coherence transition in Kondo lattices. *Physical Review B*, **39**(13), 9734, 1989.
- [8] D. L. Cox; M. Jarrel. The two-channel Kondo route to non-Fermi-liquid metals. *J. Phys.: Condens. Matter*, **8**, 9825, 1996.

- [9] P. Nozières; A. Blandin. Kondo effect in real metals. *J. Phys.*, **41**, 193, 1980.
- [10] P. D. Sacramento; P Schlottmann. Applications of the overcompensated n-channel Kondo problem. *J. Appl. Phys.*, **70**(10), 5806, 1991.
- [11] G. Zarand; G. T. Zimányi; F. Wilhelm. Tw-channel versus infinite-channel Kondo models for the single-electron transistor. *Physical Review B*, **62**(12), 8137, 2000.
- [12] D. L. Cox. Quadrupolar Kondo Effect in Uranium Heavy-Electron Materials? *Phys. Rev. Letters*, **59**(11), 1240, 1987.
- [13] C. L. Seaman; M. B. Maple; B. W. Lee; S. Ghamaty; M. S. Torikachvili; J. S. Kang; L. Z. Liu; J. W. Allen; D. L. Cox. Evidence for Non-Fermi-Liquid Behavior in the Kondo Alloy $Y_{1-x}U_xPd_3$. *Phys. Rev. Letters*, **67**(20), 2882, 1991.
- [14] I. Affleck; A. W. W. Ludwig; H. B Pang; D. L. Cox. Relevance of anisotropy in the multichannel Kondo effect: Comparison of conformal field theory and numerical renormalization-group results. *Physical Review B*, **45**(14), 7918, 1992.
- [15] K. G. Wilson. The renormalization group: Critical phenomena and the Kondo problem. *Reviews of Modern Physics*, **47**(04), 773, 1975.
- [16] A. M. Tsvelick; P. B. Wiegmana. Exact Results in the Theory of Magnetic Alloys. *Adv. Phys.*, **32**(4), 453, 1983.
- [17] D. L. Cox. *Private Communication*, 1997.
- [18] T. Kim; D. L. Cox. Theory of One-Channel versus Multichannel Kondo Effects for Ce^{3+} Impurities. *Physical Review Letters*, **75**(8), 1622, 1995.
- [19] H. R. Krishna-Murthy; J. W. Wilkins; K. G. Wilson. Renormalization-group approach to the Anderson model of dilute magnetic alloys - Static properties for the symmetric case. *Physical Review B*, **21**(03), 1003, 1980.

- [20] M. Yoshida; M. A. Whitaker; L. N. Oliveira. Renormalization-Group calculation of excitation properties for impurity models. *Physical Review B*, **41**(13), 9403, 1990.
- [21] W. C. Oliveira. Método Generalizado do Grupo de Renormalização Numérico para o Cálculo de Propriedades Termodinâmicas de Impurezas em Metais. Tese de Doutorado, 1994.
- [22] S. C. Costa; C. A. Paula; V. L. Líbero; L. N. Oliveira. Numerical renormalization-group computation of specific heats. *Physical Review B*, **55**(1), 30, 1997.
- [23] H. B. Pang; D. L. Cox. Stability of the fixed point of the two-channel Kondo Hamiltonian. *Physical Review B*, **44**(17), 9454, 1991.
- [24] N. Andrei; C. Destri. Solution of the Multichannel Kondo Problem. *Physical Review Letters*, **52**, 364, 1984.
- [25] P. D. Sacramento; P. Schlottmann. Low-temperature properties of a two-level system interacting with conduction electrons: An application of the overcompensated multichannel Kondo model. *Phys. Rev. B*, **43**, 13294, 1991.
- [26] J. V. B. Ferreira; L. N. Oliveira; D. L. Cox; V. L. Líbero. Non-Fermi liquid fixed points of a 2-channel Anderson Model. *JMMM - Proceedings of ICM2000*, 2001.
- [27] J. V. B. Ferreira; L. N. Oliveira; D. L. Cox; V. L. Líbero. Magnetic Susceptibility of a 2-channel Anderson Model. *JMMM - Proceedings of ICM2000*, 2001.
- [28] J. R. Schrieffer; P. A. Wolff. Relation between the Anderson and Kondo Hamiltonians. *Phys. Review*, **149**(2), 491, 1966.
- [29] P. W. Anderson. Localized Magnetic States in Metals. *Physical Review*, **124**(01), 41, 1961.
- [30] A. C. Hewson. The Kondo Problem to Heavy Fermions. Press Syndicate of the University of Cambridge, 1993.

- [31] S. C. Costa. Calor Específico do Modelo de Anderson de Uma Impureza por Grupo de Renormalização Numérico. Dissertação de Mestrado, IFSC-USP, 1995.
- [32] L. L. Hirst. Theory of the coupling between conduction electrons and moments of the 3d and 4f ions in metals. *Adv. Phys*, **27**(2), 231, 1978.
- [33] R. Allub; A. A. Aligia. Ground state and magnetic susceptibility of intermediate-valence Tm impurities. *Physical Review B*, **52**(11), 7987, 1995.
- [34] A. A. Aligia. Magnetic, nonmagnetic, and non-Fermi-liquid ground state of an impurity fluctuating between two magnetic configurations. *Physical Review B*, **52**(17), 12497, 1995.
- [35] K. G. Wilson. Renormalization Group and Critical Phenomena: Renormalization Group and the Kadanoff Scaling Picture. *Phys. Rev. B*, **4**(9), 3174, 1971.
- [36] K. G. Wilson. Renormalization Group and Critical Phenomena: Phase-Space Cell Analysis of Critical Behavior. *Phys. Rev. B*, **4**(9), 3184, 1971.
- [37] L. N. Oliveira; J. Wilkins. Specific Heat of the Kondo Model. *Physical Review Letters*, **47**(21), 1553, 1981.
- [38] V. L. Líbero; L. N. Oliveira. Spectral Density for Fermion Tunneling between Two Centers in a Metallic Environment. *Phys. Rev. Letters*, **65**(16), 2042, 1990.
- [39] J. V. B. Ferreira; V. L. Líbero. Specific Heat for ionic tunneling in a metallic environment. *Physical Review B*, **61**(16), 10615, 2000.
- [40] R. Haydock. Solid State Physics. H. Ehrenreich, F. Seitz, and D. Turnbull, 1980.
- [41] J. V. B. Ferreira. Estudo do calor específico de um sistema de dois níveis acoplado a um banho fermiônico. Dissertação de Mestrado, 1995.
- [42] H. O. Frota. Fotoemissão no Modelo de Anderson para Compostos de Terras-Raras com Valência Flutuante. Tese de Doutorado, IFQSC-USP, 1995.

- [43] B. A. Jones; C. M. Varma; J. W. Wilkins. Low Temperature Properties of the Two-Impurity Kondo Hamiltonian. *Physical Review Letters*, **61**(1), 125, 1988.
- [44] A. L. Fetter; J. D. Walecka. Quantum Theory of Many-Particle Systems. New York, MCGRAW-HILL, 1971.
- [45] E. U. Condon; H. Odabasi. Atomic Structure. Cambridge University Press, 1989.
- [46] H. M. Deitel; P. J. Deitel. C++, How To Program. Prentice Hall, 1994.
- [47] B. Stroustrup. The C++ Programming Language. Addison-Wesley Publishing Company, 1994.
- [48] C. A. Paula. Densidade Espectral para o Modelo de Anderson de duas impurezas. Tese de Doutorado, IFSC/DFCM - USP, 1998.