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

CALOR ESPECÍFICO DO MODELO DE ANDERSON DE UMA IMPUREZA POR GRUPO DE RENORMALIZAÇÃO NUMÉRICO

Sandra Cristina Costa

USP / IFQSC / SBI
8-2-001097

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

ORIENTADOR: *Prof. Dr. Valter Luiz Líbero*

SÃO CARLOS

1995

IFSC — SERVIÇO DE BIBLIOTECA E INFORMAÇÃO

IFSC Universidade de São Paulo
Instituto de Física de São Carlos

Fone(0162) 72-6222
Fax (0162) 74-9151

Av. Dr. Carlos Botelho, 1465
Caixa Postal 369
CEP 13560-970 - São Carlos - SP
Brasil

MEMBROS DA COMISSÃO JULGADORA DA DISSERTAÇÃO DE MESTRADO DE **SANDRA CRISTINA COSTA** APRESENTADA AO INSTITUTO DE FISICA DE SÃO CARLOS, DA UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO, EM 24/03/1995

COMISSAO JULGADORA:

Prof.Dr.Valter Luis Libero

Prof.Dr.Liderio Citfanculo Iariatti Junior

Prof.Dr.Makoto Yoshida

Aos meus pais *Paulo* e
Deolinda e aos meus irmãos *Sergio* e *Vanessa*.

IFSC — SERVIÇO DE BIBLIOTECA E INFORMAÇÃO

Agradecimentos

Agradeço ao meu orientador, prof. Dr. Valter Luiz Líbero, pela firmeza, disponibilidade e dedicação durante todo o trabalho.

Agradeço ao prof. Dr. Luiz Nunes de Oliveira pela proposta do tema e pelas sugestões no início do trabalho.

Agradeço ao prof. Dr. Makoto Yoshida, ao prof. Dr. Roberto Hessel e, em especial, ao prof. Dr. Renê Moreno que me apoiaram e me incentivaram apesar das minhas hesitações.

Agradeço ao Samuel pelo capricho na elaboração das figuras.

Agradeço aos meus pais pela compreensão, pelo empenho em fazer o máximo que podem por nós e por sempre saberem como nos encorajar nos momentos de medo ou de dúvida. Aos meus irmãos pelo apoio incondicional e pela forte amizade que nos une.

Para não incorrer no erro do esquecimento de algum nome, agradeço a todos os colegas que, direta ou indiretamente, contribuíram na confecção da dissertação.

Quero agradecer, também, à Cláudia e à Carol, ao Dante, ao Alexandre, à Cíntia, ao Henrinque e à Ro pela amizade segura e pelo carinho.

Este trabalho foi financiado pela Coordenadoria de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES).

Conteúdo

Resumo 1

Lista de Figuras ii

Resumo iv

Abstract v

1 Introdução 1

2 Modelo de Anderson: Propriedades Gerais 6

3 Grupo de Renormalização Numérico 10

3.1 Discretização Logarítmica 11

3.2 Definição da base discreta 13

3.3 Truncamento 16

4 Modelo de Nível Ressonante 19

4.1 Hamiltoniano de Condução 20

4.2 Pontos Fixos da Transformação do GRN 24

4.3 Nível Ressonante 26

4.4 Cálculo da Suscetibilidade Magnética e do Calor Específico 30

4.4.1 Estudo das oscilações da Suscetibilidade Magnética e do Calor Específico 32

5 Diagonalização Iterativa 39

6 Cálculo da suscetibilidade magnética e do calor específico do Modelo de Anderson simétrico 49

IFSC — SERVIÇO DE BIBLIOTECA E DOCUMENTAÇÃO

6.1 Suscetibilidade Magnética 49
6.2 Calor Específico 53
6.2.1 Ressonância de Kondo 56
6.2.2 Linearidade do Calor Específico a Temperaturas Baixas 58
6.2.3 Pico de Schottky 59

7 Conclusão **62**

Apêndices **64**

A Teorema de Wigner-Eckart **64**

Referências **67**

Lista de Figuras

1.1 Escala logarítmica de energia variando de -1 a 1, onde $\Lambda > 1$ e $0 < z < 1$. No procedimento de cálculo do Grupo de Renormalização, esta escala substitui o contínuo da banda de condução que tem largura 2D. As energias são medidas em relação ao nível de Fermi no centro da banda. 5

1.2 Suscetibilidade magnética (o) e calor específico (•) do Modelo de Anderson simétrico obtidos neste trabalho pelo GRN usando o procedimento *intercalado*. A linha cheia na ressonância de Kondo (pico à esquerda) é a curva exata obtida pelo *ansatz* de Bethe com $K_B T_K = 6.2 \cdot 10^{-5}$D. A linha cheia no pico de Schottky (pico à direita) é obtida no Modelo de Nível Ressonante com hibridização V=0.067D e ε_d=U/2, onde ε_d é a energia do orbital da impureza unicamente ocupado. Os parâmetros usados foram $\Lambda = 4$, $z_1 = 0.25$ e $z_2 = 0.75$. 5

2.1 Esquema do Modelo de Anderson simétrico onde $\varepsilon_{\vec{K}\mu}$ é a energia de um elétron da banda de conducão, ε_d é a energia do orbital da impureza, U é a repulsão Coulombiana no orbital da impureza e V é a hibridização entre os estados da banda e o estado da impureza. A denominação simétrico vem da relação $2\varepsilon_d + U = 0$ imposta ao modelo. 7

3.1 Em (a) mostramos a banda de condução no estado fundamental: todos os níveis abaixo do nível de Fermi estão preenchidos e todos acima, vazios. Qualquer excitacão elétron-buraco de 0 a 2D pode ocorrer. Em (b) estão os níveis discretos de energia em unidades da meia largura D da banda de condução que substituirão o contínuo de níveis da banda de condução. Nesta escala, que vai de -1 a 1, o nível de energia mais alto é escolhido como sendo Λ^{-z} e os demais são escolhidos dividindo-se por Λ sucessivamente. O mesmo é feito para as energias negativas. Em (c) observa-se que ampliando ou diminuindo a escala de energia, a estrutura de níveis em torno do nível de Fermi permanece a mesma mostrando que a banda discretizada logaritmicamente é invariante por mudança de escala discreta. 12

3.2 Cascas esféricas dando as localizações das funções de onda na base $\{f_n\}$. A distância entre as cascas nesta escala de energia é proporcional a $\Lambda^{1-z-n/2}$. . . . 17

4.1 Diagrama de fluxo do Modelo de Nível Ressonante mostrando a evolução de dois autovalores $\widehat{\lambda}$ para N par (o) e dois autovalores λ para N ímpar (•). A invariância de escala da banda de condução é quebrada pela largura Γ do nível da impureza (no exemplo, ocorre para $N \sim 20$). Observe a troca de paridade entre os pontos fixos. Parâmetros: $\Lambda = 3$, $\hat{\varepsilon}_d = 0$ e $V = 0.005$. 29

4.2 Gráficos da suscetibilidade Magnética, indicado por (o) e do calor específico, indicado por (•) para $\Lambda = 2.5$ e $z = 1$ que é o GRN padrão. 33

4.3 Esquema do procedimento *intercalado* mostrando, como exemplo, uma banda discretizada com $\Lambda = 3$ e $z = 1$, uma discretizada com $\Lambda = 9$ e $z = 0.5$ e outra com $\Lambda = 9$ e $z = 1$. Podemos ver que intercalando as duas bandas com $\Lambda = 9$ teremos a banda com $\Lambda = 3$, daí, o nome *intercalado* para o método. 35

4.4 Gráficos da suscetibilidade magnética para $\Lambda = 9$. A curva indicada por (o) é obtida com $z = 1$, que é o método de GRN padrão. A curva suave indicada por (•) é obtida usando-se o procedimento *intercalado* com $z_1 = 0.25$ e $z_2 = 0.75$ . . . 36

4.5 Gráficos do calor específico obtido por GRN padrão ($z = 1$). A linha mais grossa foi obtida para $\Lambda = 3$ e a mais fina, $\Lambda = 9$. Como se vê, as oscilações no calor específico são muito maiores do que na suscetibilidade magnética (ver figura anterior). 37

4.6 Gráficos do calor específico obtidos por GRN generalizado e procedimento *intercalado* para $\Lambda = 3$, indicado por (•) e para $\Lambda = 9$, indicado por (o). Para $\Lambda = 3$, foram usados $z_1 = 0.25$ e $z_2 = 0.75$ e para $\Lambda = 9$, foram usados $z_1 = 0.125$, $z_2 = 0.375$, $z_3 = 0.625$ e $z_4 = 0.875$. A linha cheia representa a curva universal exata dada pela equação (4.18). 37

6.1 Gráficos da suscetibilidade magnética obtidos para o Modelo de Anderson simétrico usando GRN e o procedimento *intercalado* com $\Lambda = 4$, $z_1 = 0.25$, $z_2 = 0.75$. Os parâmetros são $U = 0.1D$ e $V = 0.03D$ para (o) e $U = 0.1D$ e $V = 0.1D$ para (•). As linhas cheias são as curvas universais da suscetibilidade magnética de Kondo para esses parâmetros. As setas indicam as temperaturas de Kondo de cada conjunto de parâmetros. 52

6.2 Diagrama de fluxo do Modelo de Anderson simétrico, onde os símbolos (•) indicam os pontos fixos do modelo. Uma particular linha indica a evolução de um determinado autovalor de H_N. O ponto fixo H^*_{OL} é instável já que todas as linhas saem dele. Já H^*_{FA} é estável, pois todas as linhas chegam nele. H^*_{ML} poderá ser estável somente se $\Gamma = 0$; do contrário, será instável. 53

6.3 Calor específico C_{imp}, indicado por (o), e exponencial da entropia S_{imp}, indicada por (•), para o Modelo de Anderson simétrico obtidos, neste trabalho, por GRN e pelo procedimento *intercalado*. A linha cheia na ressonância de Kondo e na entropia são as curvas exatas obtidas pelo *ansatz* de Bethe com $K_B T_K = 6.2 \cdot 10^{-5} D$. A linha cheia no pico de Schottky é obtida pelo Modelo de Nível Ressonante escolhendo $\varepsilon_d = U/2$ e $V = 0.067D$ para se obter o mellhor ajuste. Os parâmetros usados foram $\Lambda = 4$, $z_1 = 0.25$ e $z_2 = 0.75$. 55

6.4 Gráficos do calor específico em função de $\frac{T}{T_K}$ obtidos por GRN e procedimento *intercalado*. São mostradas a concordância com a curva analítica de *ansatz* de Bethe e a universalidade da mesma para diferentes valores de T_K. Esta figura também mostra claramente a não universalidade dos picos de Schottky. 57

6.5 Comportamento linear do calor específico a temperaturas baixas em função de T/T_K. A linha cheia é o resultado exato obtido por *ansatz* de Bethe: $C_{imp}/K_B = 0.6777 \cdot T/T_K$, enquanto os pontos (o, • e +) representam os nossos resultados para $\Lambda = 4$, $z_1 = 0.25$ e $z_2 = 0.75$. Os valores de T_K diferem por quatro ordens de grandeza. 58

6.6 Posição do Pico de Schottky do Modelo de Anderson de uma impureza simétrico obtido por GRN (o) para $U = 0.01D$. A curva indicada pela linha cheia é dada pela Equação (6.10) e a indicada pela linha pontilhada é dada pela Equação (6.11). 60

Lista de Tabelas

4.1 Autovalores de vários Hamiltonianos H_N^{BC} para N ímpar com $\Lambda = 3$ e $z = 1$. Observe que os autovalores tendem a Λ^{l-z} para valores grandes de N. 22

4.2 Autovalores de vários Hamiltonianos H_N^{BC} para N par com $\Lambda = 3$ e $z = 1$. Observe que os autovalores tendem a $\Lambda^{l-z+1/2}$ para valores grandes de N. 23

4.3 Autovalores de H_N^{NR}, N par, para $\Lambda = 3$, $\tilde{\varepsilon}_d = 0$ e $V = 0.005$. 28

4.4 Autovalores de H_N^{NR}, N ímpar, para $\Lambda = 3$, $\tilde{\varepsilon}_d = 0$ e $V = 0.005$. 28

5.1 16 estados de base $|j, j_z, s, s_z, r; i\rangle_0$ do Hamiltoniano H_0, construídos a partir dos autoestados de H_{-1}. 45

5.2 Autovalores e autovetores de $H_{-1} = \Lambda^{-1}(\tilde{\varepsilon}_d c_{d\mu}^\dagger c_{d\mu} + \tilde{U} c_{d\uparrow}^\dagger c_{d\uparrow} c_{d\downarrow}^\dagger c_{d\downarrow})$. 46

5.3 Base de estados, autoestados e autovalores de H_0, onde as componentes j_z e s_z não aparecem devido ao uso de elementos de matriz invariantes. 48

Resumo

Neste trabalho, calculam-se o calor específico e a entropia do Modelo de Anderson simétrico de uma impureza usando o Grupo de Renormalização Numérico (GRN). O método é baseado na discretização logarítmica da banda de condução do metal hospedeiro à qual a impureza está acoplada. Porém, esta discretização introduz oscilações nas propriedades termodinâmicas. Esta inconveniência, inerente ao método, é contornável para a suscetibilidade magnética, mas é crítica para o calor específico, restringindo o alcance do GRN. Para sobrepor essa dificuldade, é usado o novo procedimento denominado *intercalado* que foi desenvolvido para o cálculo da suscetibilidade magnética de modelos de duas impurezas. Para reduzir as matrizes e o tempo computacional, é usado, também, o operador carga axial, recentemente definido no contexto do Modelo de Kondo de duas impurezas, e que é conservado pelo Hamiltoniano de Anderson simétrico. As curvas obtidas são comparadas com resultados exatos obtidos por *ansatz* de Bethe e pelo Modelo de Nível Ressonante.

Abstract

The specific heat and the entropy of the one-impurity symmetric Anderson Model are calculated using the Numerical Renormalization Group (NRG). The heart of the method is the logarithmic discretization of the metal condution band where the impurity is coupled. However, this discretization, inherent in the method, introduces oscillations in the thermodynamical properties. For the susceptibility it is not so critical but for the specific heat the usual calculation is prohibitive. To overcome this difficulty, we use the new procedure called *interleaved* that was developed to calculate the susceptibility of two-impurity models. In order to reduce the matrices and computation time, use is made of the axial charge operator recently defined in the two-impurity Kondo Model context and that is conserved by the symmetric Anderson Hamiltonian. The curves obtained are compared with exacts results of Bethe *ansatz* and Resonant Level Model.

IFSC — SERVIÇO DE BIBLIOTECA E INFORMAÇÃO

Capítulo 1

Introdução

Desde 1930 tem-se observado em certos metais anomalias relacionadas com a presença de impurezas magnéticas que podem ser, por exemplo, átomos de metais de transição ou terras raras. O primeiro efeito observado foi um mínimo no gráfico da resistividade pela temperatura. Nesta dissertação, serão estudadas duas propriedades termodinâmicas: a suscetibilidade magnética e o calor específico. Esses sistemas (metais magnéticos dissolvidos em metais não magnéticos numa concentração menor que um por cento) são chamados ligas magnéticas diluídas e neles ocorre a formação de momentos magnéticos localizados. Estudos indicaram que o mínimo na resistência é devido ao espalhamento dos spins dos elétrons no sítio da impureza e dos elétrons de condução do metal hospedeiro [1].

Uma abordagem do problema é estudar o comportamento da impureza já que as anomalias observadas estão associadas com mudanças drásticas nas suas propriedades. A suscetibilidade magnética, por exemplo, tem um comportamento tipo Curie para temperaturas muito acima de T_K, temperatura de Kondo, onde ocorre o mínimo na resistência. Mas, para valores muito abaixo de T_K, torna-se independente da temperatura. Esses dados indicam que a impureza a temperaturas acima de T_K mantém seu momento magnético e, portanto, não sofre influência do metal que, por sua vez, apresenta um comportamento normal. Abaixo de T_K, o metal age sobre a impureza destruindo seu caráter magnético e, em conseqüência, tem suas propriedades físicas alteradas.

Em 1961, Anderson [2] propôs um modelo para descrever os momentos magnéticos localizados. O modelo, apresentado no próximo capítulo, leva em conta efeitos de muitos corpos e possui dois parâmetros para caracterizar a existência ou não de momento magnético líquido e a influência do metal sobre a impureza e vice-versa. Um deles é a repulsão Coulombiana U entre elétrons de spins contrários no sítio da impureza e o outro, a hibridização V, mistura as funções de onda dos elétrons da impureza e dos elétrons de condução. Dessa forma, o modelo leva em conta a competição entre magnetismo localizado e magnetismo itinerante.

Pode-se dizer que o modelo é simples, porém, a sua solução encontrou dificuldades pois as propriedades físicas das ligas magnéticas diluídas dependem logaritmicamente da temperatura para valores abaixo de T_K. Cálculos perturbativos mostram divergências logarítmicas com o decréscimo da temperatura, indicando falha na teoria de perturbação para temperaturas abaixo de T_K.

Esses problemas foram encontrados por Kondo [1] estudando a resistividade dessas ligas e são conhecidos como problema Kondo.

O termo logarítmico encontrado por Kondo para a resistividade é $\sim \ln(T/D)$, onde D é a meia largura da banda de condução que representa o metal hospedeiro. Este termo aparece nos cálculos do modelo de Anderson no limite $U \rightarrow \infty$. Nesse limite o modelo de Anderson se reduz ao modelo de Kondo. A equivalência entre os dois foi demonstrada por Schrieffer e Wolff [3].

O primeiro tratamento bem sucedido do problema, evitando teoria de perturbação, foi dado por Wilson [4] através do Grupo de Renormalização Numérico (GRN). Esse método permitiu o entendimento dos processos físicos que ocorrem em temperaturas bem baixas e, também, a transição entre duas situações bem distintas, as regiões de *crossover*.

Wilson calculou a suscetibilidade magnética da impureza usando o Modelo de Kondo [4]. A segunda aplicação do método foi feita por Krishna-murthy, Wilkins e Wilson que calcu-

laram a suscetibilidade magnética para o Modelo de Anderson [5].

Além do GRN, surgiram outros métodos também não perturbativos que têm sucesso como o *ansatz* de Bethe [8] que é analítico e o método de Monte Carlo [9]. Porém, até o momento, esses métodos têm restrições que o GRN pôde superar. Por exemplo, Monte Carlo ainda tem problemas para chegar a temperaturas baixas, prejudicando o conhecimento do estado fundamental e o *ansatz* de Bethe ainda não pôde ser aplicado para cálculos de propriedades dinâmicas. Outro método é a expansão 1/N [10], mas este não consegue tratar a baixa degenerescência de spin de forma adequada.

No método de GRN, que é usado neste trabalho, o contínuo de níveis de energia é substituído por um conjunto de níveis discretos. A razão entre dois níveis de energia sucessivos é um parâmetro Λ. A escala discreta assim definida é uma escala logarítmica como mostrado na Figura (1.1). Todo o procedimento é baseado no parâmetro Λ que controla a precisão do método. Valores típicos são da ordem de três [4] [5].

A introdução do parâmetro z é uma generalização do GRN para cálculo de propriedades dinâmicas feita por Yoshida et al [11].

Essa generalização também proporcionou um novo procedimento, desenvolvido recentemente, que tornou possível o cálculo da suscetibilidade magnética de modelos de uma ou duas impurezas [12] [13] e do calor específico do modelo de uma impureza nesta dissertação.

O cálculo da suscetibilidade em modelos contendo várias impurezas apresenta problemas de tempo de computação que aumenta exponencialmente com o número de impurezas, porém, diminue para valores maiores de Λ. O cálculo é viável computacionalmente para valores de Λ da ordem de 10. Mas, para esses valores a suscetibilidade apresenta oscilações indesejáveis inerentes ao método. As oscilações foram retiradas pelo procedimento citado acima denominado *intercalado* [12] [13] que será exposto no capítulo 4.

O procedimento *intercalado* foi estudado para o cálculo da suscetibilidade magnética de

um caso especial do Modelo de Anderson onde $U = 0$, o chamado Modelo de Nível Ressonante [12]. Foi aplicado ao cálculo da suscetibilidade de modelos de duas impurezas [12] [13].

Para modelos de uma impureza, as propriedades termodinâmicas podem ser calculadas com $\Lambda \sim 3$. Mas, o calor específico apresenta oscilações mesmo para esses valores de Λ.

Neste trabalho, calculamos o calor específico do Modelo de Nível Ressonante e do Modelo de Anderson simétrico de uma impureza através do procedimento *intercalado*. A Figura (1.2) mostra a suscetibilidade magnética e o calor específico que obtivemos.

A análise do comportamento desses gráficos será feita no capítulo 6. Por hora, é importante ressaltar que o procedimento *intercalado* amplia consideravelmente o alcance do método de GRN, tornando possíveis resultados como esses.

As linhas cheias da Figura (1.2) são dois ajustes que fizemos ao calor específico: o pico à esquerda, chamado pico de Kondo, foi comparado ao resultado obtido pelo *ansatz* de Bethe [7] e o da direita, que é um pico tipo de Schottky, comparamos com resultados do Modelo de Nível Ressonante. O pico de Schottky ocorre para temperaturas muito altas as quais um metal não poderia atingir. Porém, é uma estrutura pertinente ao Modelo de Anderson e, por isso, dedicamos atenção a ele. Essas comparações e discussões também se encontram no capítulo 6.

No capítulo 2, descrevemos o modelo de Anderson. O método de Renormalização Numérico é apresentado no capítulo 3. No capítulo 4, estudamos o Modelo de Nível Ressonante. No capítulo 5, diagonalizamos iterativamente o Hamiltoniano de Anderson. O último, o sétimo, inclue as conclusões e sugestões.

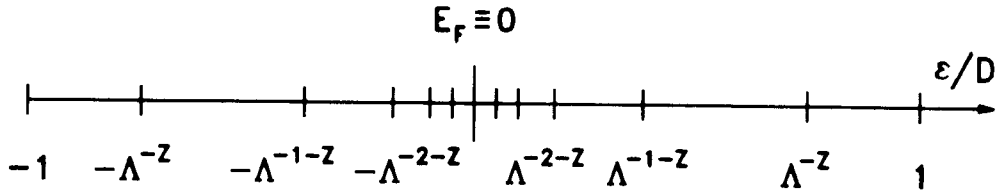

Figura 1.1: Escala logarítmica de energia variando de -1 a 1, onde $\Lambda > 1$ e $0 < z < 1$. No procedimento de cálculo do Grupo de Renormalização, esta escala substitui o contínuo da banda de condução que tem largura 2D. As energias são medidas em relação ao nível de Fermi no centro da banda.

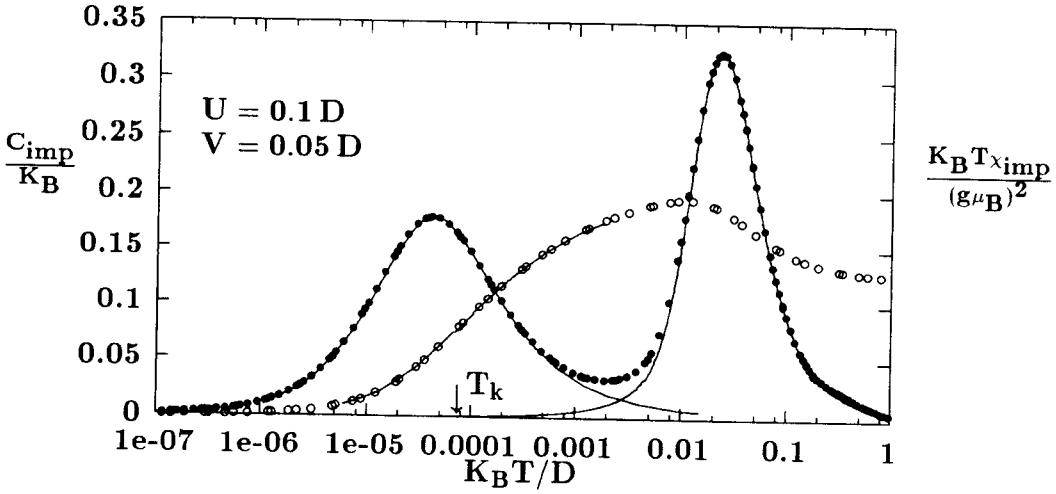

Figura 1.2: Suscetibilidade magnética (o) e calor específico (•) do Modelo de Anderson simétrico obtidos neste trabalho pelo GRN usando o procedimento *intercalado*. A linha cheia na ressonância de Kondo (pico à esquerda) é a curva exata obtida pelo *ansatz* de Bethe com $K_B T_K = 6.2 \cdot 10^{-5}$D. A linha cheia no pico de Schottky (pico à direita) é obtida no Modelo de Nível Ressonante com hibridização V=0.067D e ε_d=U/2, onde ε_d é a energia do orbital da impureza unicamente ocupado. Os parâmetros usados foram $\Lambda = 4$, $z_1 = 0.25$ e $z_2 = 0.75$.

Capítulo 2

Modelo de Anderson: Propriedades Gerais

Neste modelo, o metal hospedeiro é representado por um gás de elétrons livres. A impureza é introduzida como um nível de energia extra separado da banda de condução que representa o gás de elétrons livres. Esse nível extra representa o orbital d do metal de transição ou o orbital f da terra rara, que vamos representar sempre por d. Porém, apenas a degenerescência de spin 1/2 é mantida. Dessa forma, o orbital da impureza possui quatro configurações possíveis: vazio, ocupado com um elétron com spin para cima, com um elétron com spin para baixo ou duplamente ocupado.

A energia do orbital d é ε_d, que vamos considerar negativa e medida em relação ao nível de Fermi. Vamos supor a banda de condução simétrica em relação ao nível de Fermi, E_F, de largura 2D e com relação de dispersão linear $\varepsilon_K = v_F K$, válida próximo a E_F, sendo $v_F = K_F/m$ a velocidade de Fermi. O termo de interação Coulombiana U aparece quando o nível d está duplamente ocupado, portanto tendo energia $2\varepsilon_d + U$.

O acoplamento entre o hospedeiro e a impureza é representado pela hibridização entre os estados de condução e o estado da impureza através do elemento de matriz não diagonal V. Esse termo realiza a troca de elétrons entre a banda de condução e o orbital d. O elétron permanece no orbital d por um tempo finito e volta para a banda e vice-versa. Assim, o nível impuro tem uma incerteza na sua energia dada por $\Gamma = \pi\rho V^2$ que é obtida via regra de ouro de Fermi; ρ é a densidade de estados no nível de Fermi.

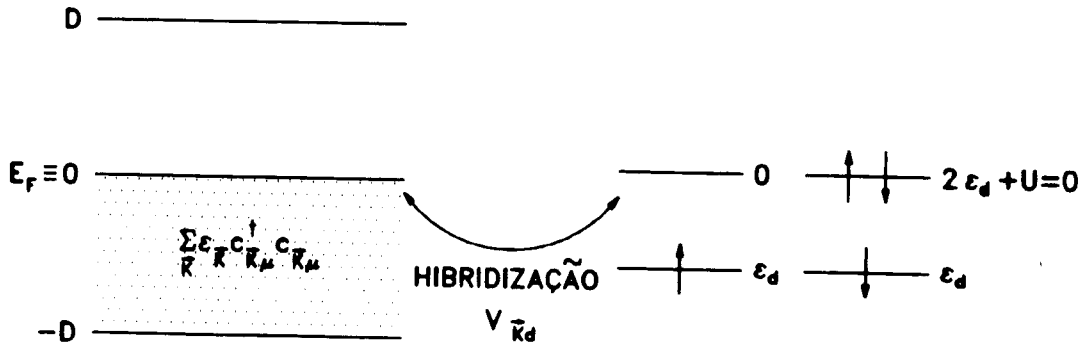

Figura 2.1: Esquema do Modelo de Anderson simétrico onde $\varepsilon_{\vec{K}\mu}$ é a energia de um elétron da banda de conducão, ε_d é a energia do orbital da impureza, U é a repulsão Coulombiana no orbital da impureza e V é a hibridização entre os estados da banda e o estado da impureza. A denominação simétrico vem da relação $2\varepsilon_d + U = 0$ imposta ao modelo.

A Figura (2.1) mostra um esquema do modelo de Anderson para o caso particular em que $2\epsilon_d + U = 0$. Esse caso possui simetria partícula-buraco e é denominado Modelo de Anderson simétrico e será o caso estudado neste trabalho.

O Hamiltoniano de Anderson possui, então, quatro termos: um correspondente à energia da banda de condução, um correspondente à energia do orbital da impureza, um é a hibridização e o outro é a repulsão Coulombiana no orbital d. Em linguagem de segunda quantização, é dado por:

$$H_A = \sum_{\vec{K}} \varepsilon_{\vec{K}} c^{\dagger}_{\vec{K}\mu} c_{\vec{K}\mu} + \varepsilon_d c^{\dagger}_{d\mu} c_{d\mu} + V \sum_{\vec{K}} (c^{\dagger}_{\vec{K}\mu} c_{d\mu} + c^{\dagger}_{d\mu} c_{\vec{K}\mu}) + U c^{\dagger}_{d\uparrow} c_{d\uparrow} c^{\dagger}_{d\downarrow} c_{d\downarrow} \ , \qquad (2.1)$$

onde $c^{\dagger}_{\vec{K}\mu}$ cria um elétron de momentum $\vec{K}$ e spin $\mu = \pm 1/2$ na banda e $c^{\dagger}_{d\mu}$ cria um elétron no orbital d de spin $\mu = 1/2$. A soma em μ é subentendida. Por ter simetria partícula-buraco, o Hamiltoniano acima é invariante sob as transformações $c_{\vec{K}\mu} \rightarrow c^{\dagger}_{-\vec{K}\mu}$ e $c_{d\mu} \rightarrow -c^{\dagger}_{d\mu}$.

Além da idealização de não considerar a degenerescência do orbital d, o modelo in-

clue outras simplificações como considerar V constante. Também não leva em conta o campo cristalino, interações entre elétrons num mesmo orbital da banda de condução, interações entre elétrons em orbitais diferentes, etc. A inclusão de termos como esses poderia tornar o modelo mais realístico.

Tais termos, e ainda outros, podem ser incluídos no modelo, por vezes, com facilidade. Dessa forma pode ser aplicado a outros sistemas como o de duas impurezas, os compostos de férmions pesados, os compostos de valência flutuante, óxido supercondutores, etc.

Para a compreensão do magnetismo em metais, é essencial a questão da formação de momentos magnéticos. Podemos ter uma idéia física do problema comparando as escalas de energia U e Γ. Temos três situações de interesse: $U \gg \Gamma$, $U \sim \Gamma$ e $U \ll \Gamma$.

Se tivermos a primeira situação, $U \gg \Gamma$, e o sistema estiver a uma temperatura $K_BT \gg U$, esses dois parâmetros podem ser desprezados já que são escalas de energia muito menores que a escala de interesse K_BT. Dessa forma, o metal e a impureza são independentes um do outro. Nesse caso, as quatro configurações possíveis para o orbital d podem ocorrer, em especial as configurações singelamente ocupadas responsáveis pela formação de momento magnético. A impureza mantém, então, seu caráter magnético e a liga tem um comportamento esperado. Quando a escala de interesse, K_BT, é da ordem de U, dizemos que a escala U torna-se relevante e começa a modificar as propriedades do sistema. Nesta faixa de temperatura, as configurações vazias e duplamente ocupadas se diferenciam das unicamente ocupadas privilegiando as configurações com momento magético. Em faixas de temperaturas onde $K_BT \ll U$, podemos considerar U infinito. Temos, então, outro regime onde as configurações duplamente ocupadas e vazias estão inacessíveis e tornam-se estados virtuais que apenas realizam a troca entre as configurações de um elétron com spin para cima e para baixo que são as únicas que podem ocorrer. Dessa forma, o momento magnético líquido da impureza aumenta. Reduzindo mais a temperatura, a escala de energia Γ torna-se relevante e dá início ao acoplamento do

estado da impureza com os estados da banda. Quando K_BT for muito menor que Γ, Γ também pode ser considerado infinito. Neste limite, os estados da banda se acoplam fortemente ao estado da impureza, blindando seu caráter magnético. A banda torna-se novamente livre, porém com uma defasagem nos seus estados.

Na segunda situação, $U \sim \Gamma$, as quatro configurações são possíveis a temperaturas muito maiores que U e Γ, como na primeira situação ($U \gg \Gamma$). Então, da mesma forma temos formação de momento magnético. A segunda situação se diferencia da primeira quando temos temperaturas da ordem de U: na primeira, ocorre aumento do momento magnético pois nessa região de temperatura os estados unicamente ocupados são privilegiados; porém, na segunda situação, isso não ocorre porque, como $\Gamma \sim U$, há ainda uma forte superposição dos estados magnéticos (unicamente ocupados) com os não magnéticos (vazio e duplamente ocupado). Lembre-se que a separação entre os estados magnéticos e os não magnéticos no modelo simétrico é $U/2$. Para $K_BT \ll \Gamma \sim U$ temos essencialmente o comportamento do caso $U \gg \Gamma$.

Na terceira situação de interesse do modelo, $U \ll \Gamma$, as quatros configurações da impureza são possíveis a temperaturas muito maiores que Γ e U, como nas duas primeiras situações. Quando a escala Γ torna-se relevante, se inicia o acoplamento da impureza à banda. Se $K_BT \ll \Gamma$, a impureza se acopla fortemente à banda perdendo seu caráter magnético. A escala U não desempenhará papel importante neste caso.

Esses limites serão considerados novamente no capítulo 6, onde os limites $\Gamma = 0$ e $U = 0$, $\Gamma = 0$ e $U \to \infty$ e $\Gamma \to \infty$ e $U = \infty$ receberão a denominação especial de pontos fixos no contexto do GRN.

Capítulo 3

Grupo de Renormalização Numérico

Antes de aplicar o GRN, vamos escrever o Hamiltoniano de Anderson H_A em uma forma simplificada e mais conveniente. Simplificamos o Hamiltoniano considerando a banda de condução isotrópica, isto é, $\varepsilon_{\vec{K}}$ depende apenas de $|\vec{K}|$ e V é independente de $\vec{K}$. Além disso, usaremos a representação de energia ao invés da representação se momentum, ou seja, os operadores $c_{\vec{K}\mu}$ da Eq. (2.1) serão trocados pelos operadores $a_{\varepsilon\mu}$, onde $\varepsilon = \varepsilon_K$. Os operadores $a_{\varepsilon\mu}$ obedecem à relação de anticomutação dada por: $\{a_{\varepsilon\mu},\ a^\dagger_{\varepsilon'\mu}\} = \delta(\varepsilon - \varepsilon')$. Em termos desses operadores, a Eq. (2.1) torna-se (ver referência [4] e referência [5]-apêndice A):

$$\begin{aligned} H_A &= \int_{-D}^{D} \varepsilon a^\dagger_{\varepsilon\mu} a_{\varepsilon\mu} d\varepsilon + \varepsilon_d c^\dagger_{d\mu} c_{d\mu} + U c^\dagger_{d\uparrow} c_{d\uparrow} c^\dagger_{d\downarrow} c_{d\downarrow} \\ &+ V\rho^{1/2} \int_{-D}^{D} (a^\dagger_{\varepsilon\mu} c_{d\mu} + c^\dagger_{d\mu} a_{\varepsilon\mu}) d\varepsilon \ , \end{aligned} \tag{3.1}$$

onde a banda de condução se estende de -D a D em energia e $a^\dagger_{\varepsilon\mu}$ é um operador de Fermi que cria um elétron de energia ε e spin μ. A soma em μ é subentendida. Dessa forma, temos um Hamiltoniamo unidimensional.

Mudando para a variável adimensional $k \equiv \varepsilon/D$ e para os operadores $a_{k\mu} \equiv \sqrt{D} a_{\varepsilon\mu}$, também fermiônicos, obtemos:

$$\begin{aligned} \frac{H_A}{D} &= \int_{-1}^{1} k a^\dagger_{k\mu} a_{k\mu} dk + \frac{\varepsilon_d}{D} c^\dagger_{d\mu} c_{d\mu} + \frac{U}{D} c^\dagger_{d\uparrow} c_{d\uparrow} c^\dagger_{d\downarrow} c_{d\downarrow} \\ &+ (\frac{\Gamma}{\pi D})^{1/2} \int_{-1}^{1} (a^\dagger_{k\mu} c_{d\mu} + c^\dagger_{d\mu} a_{k\mu}) dk \ , \end{aligned} \tag{3.2}$$

onde $\Gamma = \pi\rho V^2$. Assim, temos uma forma que é mais conveniente por trabalhar com todas as grandezas adimensionais.

3.1 Discretização Logarítmica

Como a banda de condução é um contínuo de níveis de energia (10^{23} estados numa largura da ordem de 10 eV), a primeira providência no GRN é a sua discretização. A forma como ela vai ser discretizada deve, naturalmente, preservar suas características essenciais e proporcionar meios de se sobrepor as dificuldades indicadas pelas tentativas de se resolver o problema por métodos perturbativos.

O conjunto de níveis discretos que representará o contínuo de níveis da banda de condução deve ser capaz de traduzir, em escala discreta, a invariância por mudança de escala em torno do nível de Fermi, ou seja, a escala discreta deve incluir a existência de muitas escalas de energia na banda de condução; isto é, são possíveis excitações tanto entre níveis de energia muito próximos quanto entre níveis 10, 100 ou 1000 vezes maiores, por exemplo [14]. As divergências logarítmicas encontradas no tratamento por perturbação são uma indicação dessa propriedade.

A idéia mais imediata, de certo, é uma discretização linear, a qual preserva a invariância por mudança de escala discreta. Porém, esta não oferece tratamento distinto às muitas escalas de energia do problema.

Uma discretização logarítmica, motivada pelas divergências logarítmicas do método perturbativo, foi escolhida [4]. A Figura (3.1) mostra a banda de condução discretizada logaritmicamente: $k = \varepsilon/D$ foi definido acima e o parâmetro $\Lambda > 1$ é a razão entre duas energias sucessivas. Quando $\Lambda \to 1$, recuperamos o contínuo de níveis. O parâmetro z varia entre 0 e

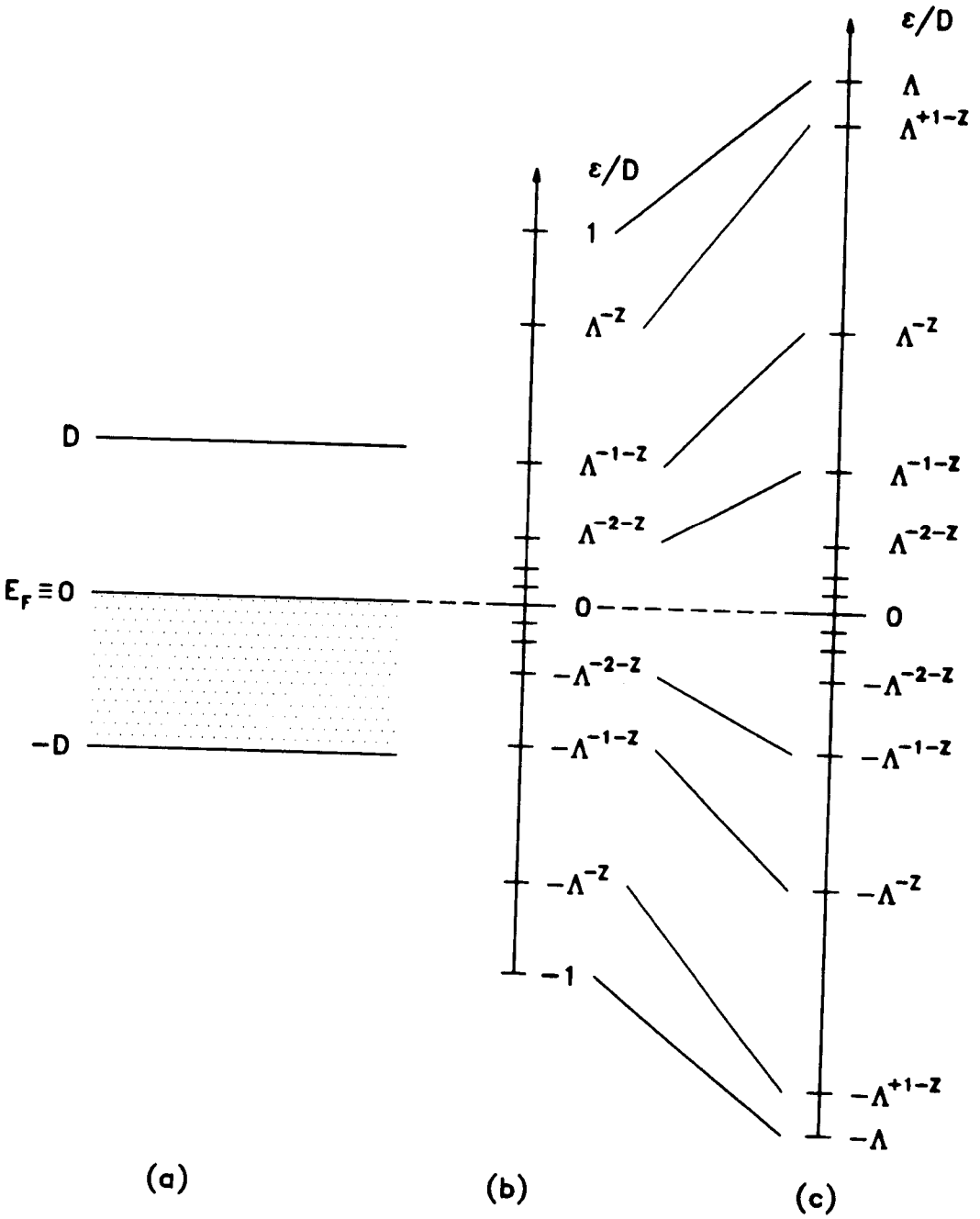

Figura 3.1: Em (a) mostramos a banda de condução no estado fundamental: todos os níveis abaixo do nível de Fermi estão preenchidos e todos acima, vazios. Qualquer excitacão elétron-buraco de 0 a 2D pode ocorrer. Em (b) estão os níveis discretos de energia em unidades da meia largura D da banda de condução que substituirão o contínuo de níveis da banda de condução. Nesta escala, que vai de -1 a 1, o nível de energia mais alto é escolhido como sendo Λ^{-z} e os demais são escolhidos dividindo-se por Λ sucessivamente. O mesmo é feito para as energias negativas. Em (c) observa-se que ampliando ou diminuindo a escala de energia, a estrutura de níveis em torno do nível de Fermi permanece a mesma mostrando que a banda discretizada logaritmicamente é invariante por mudança de escala discreta.

1 e proporciona um procedimento alternativo de se recuperar o contínuo [11]. A discretização original de Wilson é obtida para $z = 1$. Essa discretização tem o efeito de separar as muitas escalas de energia da banda de condução e é invariante por mudança de escala discreta como mostrado na Figura (3.1).

Na prática, a discretização logarítmica é preferível pois a região de maior interesse é em torno do nível de Fermi a qual é atingida mais rapidamente e com um número muito menor de divisões em comparação com a linear.

O Hamiltoniano do modelo, com essa discretização, é a soma de vários termos, cada um associado a uma escala de energia, como na estrutura fina e hiperfina da Física Atômica, onde a separação do Hamiltoniano em termos associados a escalas de energia diferentes é mais evidente. A comparação é válida mas grosseira; além disso, mesmo dividido em partes, onde cada uma delas poderia ser olhada como uma perturbação à soma das demais, o Hamiltoniano não pode ser tratado por método de perturbação.

3.2 Definição da base discreta

Agora vamos definir os operadores discretos que substituirão os operadores contínuos $a_{k\mu}$ do Hamiltoniano (3.2). Esta seção segue as referências [5] e [15].

A banda de condução, representada pela reta $k \equiv \varepsilon/D$ discretizada, Figura (3.1), é uma seqüência de intervalos onde o primeiro é $1 > k > \Lambda^{-z}$ e o n-ésimo é $\Lambda^{-n-z} > k > \Lambda^{-1-n-z}$ para $k > 0$, onde n=0,1,2,.... Para $k < 0$, o primeiro intervalo vai de -1 a $-\Lambda^{-z}$ e o n-ésimo vai de $-\Lambda^{-n-z}$ a $-\Lambda^{-1-n-z}$.

Em cada intervalo podemos definir um conjunto discreto e completo de funções de onda ortonormais dadas por:

$$\Psi_l^{\pm}(k) = \begin{cases} \frac{1}{(1-\Lambda^{-z})^{1/2}} exp(\pm \frac{i2\pi lk}{1-\Lambda^{-z}}) & \text{, se } \Lambda^{-z} < \pm k < 1 \\ 0 & \text{, fora desse intervalo} \end{cases} \tag{3.3}$$

e

$$\Psi_{nl}^{\pm}(k) = \begin{cases} \frac{\Lambda^{(n+z)/2}}{(1-\Lambda^{-1})^{1/2}} exp(\pm \frac{i2\pi\Lambda^{n+z}lk}{1-\Lambda^{-1}}) & \text{, se } \Lambda^{-n-z-1} < \pm k < \Lambda^{-n-z} \\ 0 & \text{, fora desse intervalo} \end{cases} \tag{3.4}$$

Os sinais + e − se referem aos valores positivos e negativos de k e o índice $l = -\infty, \infty$ são os índices harmônicos de Fourier.

Expandindo os operadores $a_{k\mu}$ nesta base, temos:

$$a_{k\mu} = \sum_l [a_{l\mu}\Psi_l^+(k) + b_{l\mu}\Psi_l^-(-k)] + \sum_{ln} [a_{ln\mu}\Psi_{ln}^+(k) + b_{ln\mu}\Psi_{ln}^-(-k)] \,, \tag{3.5}$$

onde $a_{l\mu}$, $b_{l\mu}$, $a_{ln\mu}$ e $b_{ln\mu}$ formam um conjunto completo e discreto de operadores fermiônicos dados por:

$$a_{l\mu} = \int_{\Lambda^{-z}}^{1} dk[\Psi_l^+(k)]^* a_{k\mu}, \qquad b_{l\mu} = \int_{-1}^{-\Lambda^{-z}} dk[\Psi_l^-(k)]^* a_{k\mu}$$

$$a_{ln\mu} = \int_{\Lambda^{-1-n-z}}^{\Lambda^{-n-z}} dk[\Psi_{ln}^+(k)]^* a_{k\mu}, \qquad b_{ln\mu} = \int_{-\Lambda^{-n-z}}^{-\Lambda^{-1-n-z}} dk[\Psi_{ln}^-(k)]^* a_{k\mu}.$$

onde os limites de integração se devem aos intervalos onde $\Psi_{nl}^{\pm}(k)$ é não nula, como definido nas Eq. (3.3) e (3.4).

O operador $a_{l\mu}^\dagger$ cria um elétron no primeiro intervalo para $k > 0$; $a_{ln\mu}^\dagger$ cria um elétron no segundo intervalo se n=0, no terceiro se n=1, etc. O mesmo para os operadores $b_{l\mu}^\dagger$ e $b_{ln\mu}^\dagger$ que criam elétrons com $k < 0$.

Para escrever o Hamiltoniano (3.2) em termos desses novos operadores precisamos dos seguintes resultados, que são obtidos por substituição direta dos operadores discretos dados acima:

$$\begin{aligned}\int_{-1}^{1} k a^{\dagger}_{k\mu} a_{k\mu} dk &= \frac{1+\Lambda^{-z}}{2}\sum_{l}(a^{\dagger}_{l\mu}a_{l\mu} - b^{\dagger}_{l\mu}b_{l\mu}) + \frac{1+\Lambda^{-1}}{2}\sum_{ln}\Lambda^{-(n+z)}(a^{\dagger}_{ln\mu}a_{ln\mu} - b^{\dagger}_{ln\mu}b_{ln\mu}) \\ &+ \frac{1-\Lambda^{-z}}{2\pi\imath}\sum_{l\neq l'}\sum_{n}\frac{1}{(l+l')}(a^{\dagger}_{l\mu}a_{l'\mu} - b^{\dagger}_{l\mu}b_{l'\mu})e^{\frac{2\pi\imath(l-l')}{1-\Lambda^{-1}}} \\ &+ \frac{1-\Lambda^{-1}}{2\pi\imath}\sum_{l\neq l'}\sum_{n}\frac{\Lambda^{-(n+z)}}{(l+l')}(a^{\dagger}_{ln\mu}a_{l'n\mu} - b^{\dagger}_{ln\mu}b_{l'n\mu})e^{\frac{2\pi\imath(l-l')}{1-\Lambda^{-1}}}\end{aligned} \tag{3.6}$$

e

$$\int_{-1}^{1} a_{k\mu} dk = (1-\Lambda^{-z})^{1/2}(a_{0\mu} + b_{0\mu}) - (1-\Lambda^{-1})^{1/2}\sum_{n}\Lambda^{\frac{-n+z}{2}}(a_{0n\mu} + b_{0n\mu}) \,. \tag{3.7}$$

Como se vê pela Eq. (3.7) e pela Eq. (3.2), a impureza se acopla diretamente apenas com os estados $l = 0$ da banda. O acoplamento com estados $l \neq 0$ é indireto e dado pelos dois últimos termos da Eq. (3.6). Porém, esses termos são multiplicados por $(1-\Lambda)$ que no limite $\Lambda \to 1$ tornam-se desprezíveis. Assim, faremos uma primeira simplificação desprezando os termos com $l \neq 0$. Dessa forma, estamos escolhemos as funções de onda mais localizadas na impureza. Na prática, observa-se que essa aproximação é muito boa mesmo para valores grandes de Λ [4] [5].

Então, o Hamiltoniano de Anderson na base $(a_{n\mu}, b_{n\mu})$, suprimindo o índice $l = 0$, é dado por:

$$\begin{aligned}\frac{H_A}{D} &= (\frac{1+\Lambda^{-z}}{2})(a^{\dagger}_{\mu}a_{\mu} - b^{\dagger}_{\mu}b_{\mu}) + (\frac{1+\Lambda^{-1}}{2})\sum_{n=0}^{\infty}\Lambda^{-(n+z)}(a^{\dagger}_{n\mu}a_{n\mu} - b^{\dagger}_{n\mu}b_{n\mu}) \\ &+ \frac{\varepsilon_d}{D}c^{\dagger}_{d\mu}c_{d\mu} + \frac{U}{D}c^{\dagger}_{d\uparrow}c_{d\uparrow}c^{\dagger}_{d\downarrow}c_{d\downarrow} + (\frac{2\Gamma}{\pi D})^{1/2}(f^{\dagger}_{0\mu}c_{d\mu} + c^{\dagger}_{d\mu}f_{0\mu}) \,,\end{aligned} \tag{3.8}$$

onde, por definição,

$$\begin{aligned}f_{0\mu} &\equiv \frac{1}{\sqrt{2}}\int_{-1}^{1} a_{k\mu} dk = \\ &= (\frac{1-\Lambda^{-z}}{2})^{1/2}(a_{\mu} + b_{\mu}) + (\frac{1-\Lambda^{-1}}{2})^{1/2}\sum_{n=0}^{\infty}\Lambda^{\frac{-(n+z)}{2}}(a_{n\mu} + b_{n\mu}) \,.\end{aligned} \tag{3.9}$$

3.3 Truncamento

A próxima etapa é truncar o Hamiltoniano pois, apesar de ser discreta, a base $(a_{n\mu}, b_{n\mu})$ ainda é infinita e todos os seus termos se acoplam à impureza. Um truncamento aqui afetaria a interação banda-impureza, prejudicando o cálculo das propriedades físicas. Por isso, uma nova base, a dos $\{f_{n\mu}\}$, obtida de uma transformação unitária dos operadores $(a_{n\mu}, b_{n\mu})$, foi proposta por Wilson. Essa base inclue o operador $f_{0\mu}$ como definido acima e possui acoplamento apenas entre vizinhos próximos: $f_{n\mu}$ com $f_{(n-1)\mu}$ ou $f_{(n+1)\mu}$. Apenas $f_{0\mu}$ se acopla diretamente à impureza e os demais, $f_{1\mu}$, $f_{2\mu}$, ..., criam funções de onda esféricas em torno da impureza, como ilustrado na Figura (3.2). Nessa base, a banda de condução toma a seguinte forma tridiagonal:

$$H_{bc} = \frac{D(1+\Lambda^{-1})}{2} \sum_{n=0}^{\infty} \epsilon_n^z (f_{n\mu}^\dagger f_{(n+1)\mu} + f_{(n+1)\mu}^\dagger f_{n\mu}) \ , \tag{3.10}$$

onde os elementos ϵ_n^z são encontrados numericamente através de um procedimento recursivo desenvolvido na referência [15]. Para $z = 1$, o método de Wilson dá uma fórmula fechada, mas para z qualquer conhecemos ϵ_n^z apenas numericamente. Para valores grandes de n, ϵ_n^z aproxima-se da forma assintótica:

$$\epsilon_n^z \cong \Lambda^{1-z-n/2} \ . \tag{3.11}$$

Escrito nessa base, o Hamiltoniano pode ser truncado mantendo-se exatos os cálculos que dizem respeito à impureza, ou seja, o erro introduzido pelo truncamento é independente dos parâmetros referentes à impureza, ε_d, U e Γ. Por isso se diz que o GRN é não perturbativo.

O valor de n, N, onde a série acima vai ser truncada é escolhido de acordo com a

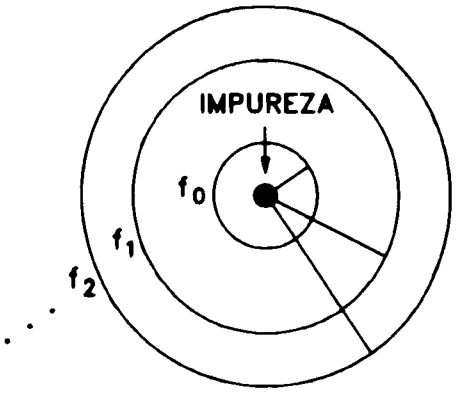

Figura 3.2: Cascas esféricas dando as localizações das funções de onda na base $\{f_n\}$. A distância entre as cascas nesta escala de energia é proporcional a $\Lambda^{1-z-n/2}$.

escala de energia de interesse do problema, de modo que o erro introduzido é perfeitamente controlado. No caso do cálculo de propriedades termodinâmicas, a energia de interesse é $\varepsilon_T = K_B T$, onde K_B é a constante de Boltzmann. Escalas de energia muito menores que ε_T podem ser descartadas. Assim, o valor máximo N é tal que a menor escala de energia ϵ_N^z seja:

$$\epsilon_N^z = \frac{1+\Lambda^{-1}}{2} D\Lambda^{1-z-N/2} \ll K_B T \tag{3.12}$$

Então, o Hamiltoniano de condução truncado e, portanto, apropriado para o tratamento numérico é:

$$H_{bc} = \frac{D(1+\Lambda^{-1})}{2} \sum_{n=0}^{N-1} \epsilon_n^z (f_{n\mu}^\dagger f_{(n+1)\mu} + f_{(n+1)\mu}^\dagger f_{n\mu}) \,. \tag{3.13}$$

Porém, H_{bc} é uma matriz onde os seus elementos são cada vez menores conforme n vai aumentando. Por isso, precisamos aumentar a escala de energia da seguinte forma: o menor elemento é $\epsilon_{N-1}^z = \frac{1+\Lambda^{-1}}{2} D\Lambda^{1-z-\frac{(N-1)}{2}}$, que é o coeficiente de $(f_{(N-1)\mu}^\dagger f_{N\mu} + \text{h.c.})$; vamos reescalar todos os elementos dividindo por $\frac{1+\Lambda^{-1}}{2} D\Lambda^{-\frac{(N-1)}{2}}$. Dessa forma, o menor elemento de matriz é sempre da ordem de um.

Assim, a forma final do Hamiltoniano H_A, que indicamos por H_N, é:

$$\begin{aligned} H_N &= \Lambda^{\frac{(N-1)}{2}}\{\sum_{n=0}^{N-1} \epsilon_n^z (f_{n\mu}^\dagger f_{(n+1)\mu} + f_{(n+1)\mu}^\dagger f_{n\mu}) + \tilde{\varepsilon}_d c_{d\mu}^\dagger c_{d\mu} \\ &+ \tilde{U} c_{d\uparrow}^\dagger c_{d\uparrow} c_{d\downarrow}^\dagger c_{d\downarrow} + (\tilde{\Gamma})^{1/2}(f_{0\mu}^\dagger c_{d\mu} + c_{d\mu}^\dagger f_{0\mu})\} \ , \end{aligned} \tag{3.14}$$

onde

$$\tilde{\varepsilon}_d = \varepsilon_d \frac{2}{D(1+\Lambda^{-1})}, \quad \tilde{U} = U\frac{2}{D(1+\Lambda^{-1})}, \quad \tilde{\Gamma} = \frac{2\Gamma}{\pi D}\frac{2}{(1+\Lambda^{-1})}.$$

O Hamiltoniano original H_A é recuperado no limite

$$H_A = \lim_{N\to\infty} \Lambda^{-\frac{N-1}{2}} \frac{D(1+\Lambda^{-1})}{2} H_N \ . \tag{3.15}$$

Para o H_N escrito nessa forma podemos escrever a seguinte relação de recorrência:

$$H_{N+1} = \Lambda^{1/2} H_N + \xi_N^z (f_{N\mu}^\dagger f_{(N+1)\mu} + f_{(N+1)\mu}^\dagger f_{N\mu}) \ , \tag{3.16}$$

onde $\xi_N^z = \Lambda^{N/2}\epsilon_N^z$.

No capítulo 5, vamos ver como usar essa relação para obter os autovalores e autovetores de H_{N+1} se conhecemos os autovalores e autovetores de H_N. De uma iteração para outra, a escala é aumentada de modo que o menor autovalor é sempre da ordem de 1. Esse procedimento iterativo é um método para se resolver Hamiltonianos como o de Anderson que são Hamiltonianos de muitos corpos, ou seja, possuem termos quárticos. Hamiltonianos quadráticos podem ser resolvidos com mais facilidade, como veremos no próximo capítulo.

Capítulo 4

Modelo de Nível Ressonante

O Modelo de Nível Ressonante é anterior ao Modelo de Anderson e recebe vários nomes diferentes dependendo da área da Física em que é aplicado; por exemplo, na Física Atômica é chamado de Modelo de Fano. Podemos encontrar na literatura, também, a denominação Modelo de Fano-Anderson, entre outras [16]. Este modelo descreve sistemas de uma impureza como o Modelo de Anderson: a impureza é um estado localizado e o hospedeiro é um contínuo de estados onde há hibridização entre o estado localizado e os estados contínuos, ou seja, as partículas podem ir da impureza para o contínuo e vice-versa. A diferença entre os dois é a repulsão Coulombiana, U, que o Modelo de Nível Ressonante não inclue.

O Hamiltoniano para o Modelo de Nível Ressonante é bem mais simples pois não possui termo quártico:

$$H^{NR} = \sum_{\vec{K}\mu} \varepsilon_{\vec{K}} c^{\dagger}_{\vec{K}\mu} c_{\vec{K}\mu} + \varepsilon_d c^{\dagger}_{d\mu} c_{d\mu} + V(c^{\dagger}_{\vec{K}\mu} c_{d\mu} + c^{\dagger}_{d\mu} c_{\vec{K}\mu}) \ . \tag{4.1}$$

No contexto do GRN, ou seja, em termos dos operadores $f_{n\mu}$ definidos no capítulo anterior, o Hamiltoniano acima se escreve:

$$\begin{aligned} H_N^{NR} &= \Lambda^{\frac{(N-1)}{2}} \{ \sum_{n=0}^{N-1} \epsilon_n^z (f^{\dagger}_{n\mu} f_{(n+1)\mu} + f^{\dagger}_{(n+1)\mu} f_{n\mu}) \\ &+ \tilde{\varepsilon}_d c^{\dagger}_{d\mu} c_{d\mu} + \tilde{\Gamma}^{1/2} (f^{\dagger}_{0\mu} c_{d\mu} + c^{\dagger}_{d\mu} f_{0\mu}) \} \ , \end{aligned} \tag{4.2}$$

SERVIÇO DE BIBLIOTECA E

onde $\tilde{\varepsilon_d}$ e $\tilde{\Gamma}$ foram definidos no capítulo anterior.

4.1 Hamiltoniano de Condução

Antes de estudar o Nível Ressonante, é muito útil diagonalizar um Hamiltoniano ainda mais simples que se refere apenas à banda de condução e que é:

$$H_N^{BC} = \Lambda^{\frac{(N-1)}{2}} \sum_{n=0}^{N-1} \epsilon_n^z (f_{n\mu}^\dagger f_{(n+1)\mu} + f_{(n+1)\mu}^\dagger f_{n\mu}) \tag{4.3}$$

Além do mais, vamos precisar dos autovalores desse Hamiltoniano para os cálculos da suscetibilidade magnética e do calor específico da impureza nas próximas seções.

Como é um Hamiltoniano quadrático, a sua diagonalização não requer processos intrincados como o método iterativo que será apresentado no capítulo 5 para o Hamiltoniano de Anderson. H_N^{BC} pode ser resolvido por um procedimento simples onde é escrito como o produto matricial

$$H_N^{BC} = v^\dagger \mathcal{H}_N^{BC} v \ ,$$

onde v é o vetor de estados de uma partícula v=($f_{0\mu}$, $f_{1\mu}$,...,$f_{N\mu}$). Diagonalizar $\mathcal{H}_N^{BC}$ equivale a diagonalizar H_N^{BC}.

A matriz $\mathcal{H}_N^{BC}$, de ordem (N+1), é real e simétrica, dada por:

$$\mathcal{H}_N^{BC} = \Lambda^{\frac{(N-1)}{2}} \begin{pmatrix} 0 & \epsilon_0^z & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ \epsilon_0^z & 0 & \epsilon_1^z & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & \epsilon_1^z & 0 & \epsilon_2^z & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \epsilon_2^z & 0 & \epsilon_3^z & \dots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \epsilon_3^z & 0 & \dots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & \epsilon_{N-1}^z \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & \epsilon_{N-1}^z & 0 \end{pmatrix}$$

Existe uma matriz ortogonal M que diagonaliza $\mathcal{H}_N^{BC}$, isto é, $\tilde{M}\mathcal{H}_N^{BC}M = \eta$, onde η é a matriz diagonal dos autovalores e M, a matriz dos autovetores de H_N^{BC}.

Então, os operadores que diagonalizam H_N^{BC} são combinações lineares dos operadores $f_{n\mu}$,

$$g_{l\mu} = \sum_n M_{nl} f_n$$

onde $l = -(N+1)/2, -(N-1)/2, ..., -1, 1, ..., (N-1)/2, (N+1)/2$, se N for ímpar ou $l = -N/2, -(N-2)/2, ..., -1, 0, 1, ..., (N-2)/2, N/2$, se N for par e os elementos M_{nl} da matriz M são encontrados numericamente [15].

Nessa base, a banda de condução se escreve, então:

$$H_N^{BC} = \sum_l \eta_l g_{l\mu}^\dagger g_{l\mu} \tag{4.4}$$

sendo η_l os autovalores de H_N^{BC}.

Como H_N^{BC} possui simetria partícula-buraco, ou seja, H é invariante sob a tranformação $g_{l\mu} \rightarrow g_{-l\mu}^\dagger$, os seus autovalores formam um conjunto simétrico em torno do nível de Fermi. Para cada autovalor positivo existe um negativo de mesmo módulo. A forma como esses autovalores se distribuem depende da paridade de N. Se N for par, haverá um autovalor zero.

Nas Tabelas (4.1) e (4.2) estão os resultados para N ímpar e N par (mostrando só o lado positivo dos espectros).

Observa-se que para N aumentando, os autovalores para N ímpar, denotados por η_l, e os autovalores para N par, denotados por $\hat{\eta}_l$, tendem, respectivamente, aos limites [15]:

$$\eta_l = \pm\Lambda^{l-z} \quad \text{, onde l=1,2,...,(N+1)/2}$$

N	η_1	η_2	η_3	η_4	η_5
1	.832050				
3	.803595	2.998044			
5	.800442	2.997554	9.000000		
7	.800093	2.997495	9.000000	27.000000	
9	.800050	2.997655	9.000003	27.000000	81.000000

Tabela 4.1: Autovalores de vários Hamiltonianos H_N^{BC} para N ímpar com $\Lambda = 3$ e $z = 1$. Observe que os autovalores tendem a Λ^{l-z} para valores grandes de N.

e

$$\widehat{\eta}_l = \pm\Lambda^{l-z+\frac{1}{2}} \quad \text{, onde l=1,2,...,N/2 e } \widehat{\eta}_0 = 0$$

Esses limites são explicados pela forma como a banda de condução foi discretizada, escalada e truncada. Na escala discreta, a razão entre duas energias sucessivas é Λ; então, os autovalores se distribuem entre o maior e o menor valor de forma que a razão entre dois autovalores sucessivos seja Λ. O menor autovalor do Hamiltoniano escalado e truncado é $-\Lambda^{(N-1)/2}$ e o maior é $\Lambda^{(N-1)/2}$ (para $z = 1$ e N grande). Dividimos esses valores por Λ sucessivamente até chegarmos às menores escalas de energia da banda de condução discretizada que na escala escolhida são: ~ 1 se N for ímpar e $\sim \sqrt{\Lambda}$ se N for par (pois N par inclue o zero).

Os operadores $f_{n\mu}$ escritos em termos dos $g_{l\mu}$, da mesma forma que os autovalores analisados acima, refletem a forma como foram escritos em termos dos operadores $a_{n\mu}$ e $b_{n\mu}$ da banda de condução discretizada.

Introduzindo operadores que criam ($h_{l\mu}^\dagger$) ou destróem ($h_{l\mu}$) buracos definidos por $h_{l\mu}^\dagger = g_{l(-\mu)}$ e $h_{l\mu} = g_{l(-\mu)}^\dagger$, podemos trabalhar apenas com os autovalores positivos, escrevendo H_N^{BC}

N	$\widehat{\eta}_0$	$\widehat{\eta}_1$	$\widehat{\eta}_2$	$\widehat{\eta}_3$	$\widehat{\eta}_4$	$\widehat{\eta}_5$
2	.000000	1.703181				
4	.000000	1.696617	5.196109			
6	.000000	1.695851	5.196098	15.588457		
8	.000000	1.695851	5.196098	15.588457	46.765372	
10	.000000	1.695759	5.196386	15.588463	46.765372	140.296115

Tabela 4.2: Autovalores de vários Hamiltonianos H_N^{BC} para N par com $\Lambda = 3$ e $z = 1$. Observe que os autovalores tendem a $\Lambda^{l-z+1/2}$ para valores grandes de N.

da seguinte forma:

$$H_N^{BC} = \sum_{l=1}^{(N+1)/2} \eta_l (g_{l\mu}^\dagger g_{l\mu} + h_{l\mu}^\dagger h_{l\mu}) \qquad \text{, para N ímpar e}$$

$$H_N^{BC} = \sum_{l=1}^{N/2} \widehat{\eta}_l (g_{l\mu}^\dagger g_{l\mu} + h_{l\mu}^\dagger h_{l\mu}) + \widehat{\eta}_0 g_{0\mu}^\dagger g_{0\mu} \quad \text{, para N par .}$$

Em termos de $g_{l\mu}$ e $h_{l\mu}$, os $f_{n\mu}$ são escritos como:

$$f_{n\mu} = \sum_{l=1}^{(N+1)/2} M_{nl}(g_{l\mu} + h_{l\mu}^\dagger) \qquad \text{, para N ímpar e}$$

$$f_{n\mu} = \sum_{l=1}^{N/2} M_{nl}(g_{l\mu} + h_{l\mu}^\dagger) + M_{n0} g_{0\mu} \quad \text{, para N par.}$$

Para $f_{0\mu}$ encontramos:

$$f_{0\mu} = \Lambda^{-(N-1)/4} \sum_{l=1}^{(N+1)/2} \alpha_l (g_{l\mu} + h_{l\mu}^\dagger) \qquad \text{, para N ímpar e}$$

$$f_{0\mu} = \Lambda^{-(N-1)/4} \{ \sum_{l=1}^{N/2} \alpha_l (g_{l\mu} + h_{l\mu}^\dagger) + \alpha_0 g_{0\mu} \} \quad \text{, para N par.}$$

Para $l \gg 1$ temos:

$$\alpha_l = (\tfrac{1-\Lambda^{-1}}{2})^{1/2} \Lambda^{(l-1)/2} \quad \text{, para N ímpar e}$$
$$\alpha_l = (\tfrac{1-\Lambda^{-1}}{2})^{1/2} \Lambda^{(l-\frac{1}{2})/2} \quad \text{, para N par.}$$

Nesse limite, $f_{0\mu}$ é, então:

$$f_{0\mu} = (\tfrac{1-\Lambda^{-1}}{2})^{1/2} \Lambda^{-(N-1)/4} \sum_{l=1}^{(N+1)/2} \Lambda^{(l-1)/2} (g_{l\mu} + h_{l\mu}^\dagger) \qquad \text{, para N ímpar e}$$

$$f_{0\mu} = (\tfrac{1-\Lambda^{-1}}{2})^{1/2} \Lambda^{-(N-1)/4} \{ \sum_{l=1}^{N/2} \Lambda^{(l-\frac{1}{2})/2} (g_{l\mu} + h_{l\mu}^\dagger) + \Lambda^{-1/4} g_{0\mu} \} \quad \text{, para N par.}$$

Mudando a variável de soma para

$$m = \frac{N-1}{2} + 1 - l \quad \text{, para N ímpar e}$$
$$m = \frac{N-1}{2} + \frac{1}{2} - l \quad \text{, para N par}$$

encontramos:

$$f_{0\mu} = (\tfrac{1-\Lambda^{-1}}{2})^{1/2} \sum_{m=0}^{(N-1)/2} \Lambda^{-m/2}(g_{l\mu} + h^{\dagger}_{l\mu}) \quad \text{, para N ímpar e}$$
$$f_{0\mu} = (\tfrac{1-\Lambda^{-1}}{2})^{1/2}\{ \sum_{m=0}^{(N-2)/2} \Lambda^{-m/2}(g_{l\mu} + h^{\dagger}_{l\mu}) + \Lambda^{-N/4} g_{0\mu}\} \quad \text{, para N par,}$$

que são versões truncadas de (3.9) com os operadores $g_{l\mu}$e $h^{\dagger}_{l\mu}$ substituindo os operadores $a_{n\mu}$ e $b_{n\mu}$. Podemos repetir o processo e encontrar $f_{1\mu}$, $f_{2\mu}$, etc.

Outro comportamento característico dos autovalores dos H_N^{BC} que podemos observar na Tabelas (4.1) e (4.2) é a repetição dos autovalores mais próximos do nível de Fermi para N's de mesma paridade. Isso caracteriza o que é chamado de *ponto fixo da Transformação de GRN* que é definida pela relação de recorrência (3.16). O conceito de ponto fixo é fundamental e será abordado na próxima seção.

4.2 Pontos Fixos da Transformação do GRN

Desde que as suas energias sejam medidas em relação ao estado fundamental, o Hamiltoniano em (4.3) satisfaz a relação de recorrência:

$$H_{N+1}^{BC} = \Lambda^{1/2} H_N^{BC} + \xi^N (f^{\dagger}_{N\mu} f_{(N+1)\mu} + f^{\dagger}_{(N+1)\mu} f_{N\mu}) + E^{BC}_{G,(N+1)} \,, \tag{4.5}$$

onde $E^{BC}_{G,(N+1)}$ é escolhida de forma que o estado fundamental de H^{BC}_{N+1} tenha energia zero. A equação (4.5) define a *Transformação do Grupo de Renormalização Numérico* que será denotada por:

$$\mathcal{T}[H_N^{BC}] = H_{N+1}^{BC} \tag{4.6}$$

A operação realizada por $\mathcal{T}$ é: dados os autovalores de H_N^{BC} e os elementos de matriz ${}_N\langle\Omega|f_{N\mu}|\Omega\rangle_N$, onde $|\Omega\rangle_N$ são autoestados de H_N^{BC}, obtemos os autovalores de H_{N+1}^{BC} e os elementos de matriz ${}_{N+1}\langle\Omega|f_{N+1\mu}|\Omega\rangle_{N+1}$, onde $|\Omega\rangle_{N+1}$ são autoestados de H_{N+1}^{BC}.

Se $\mathcal{T}$ operar sobre um Hamiltoniano H^* e resultar o mesmo H^* ($\mathcal{T}[H^*] = H^*$) dizemos que H^* é um ponto fixo de $\mathcal{T}$.

$\mathcal{T}$, na verdade, não possui pontos fixos, mas $\mathcal{T}^2$, onde $\mathcal{T}^2[H_N^{BC}] = H_{N+2}^{BC}$, que também é uma Transformação do GRN, possui.

Os pontos fixos são reconhecidos observando-se os conjuntos de autovalores obtidos para H_N^{BC} e H_{N+2}^{BC}. Se o conjunto for o mesmo (a menos dos dois últimos autovalores de H_{N+2}^{BC}, claro), dizemos que H_N^{BC} é um ponto fixo de $\mathcal{T}^2$. Esse comportamento pode ser observado nas Tabelas (4.1) e (4.2).

Esse ponto fixo de $\mathcal{T}^2$ é chamado de ponto fixo de elétrons livres e é a tradução para a escala discreta da invariância de escalas de energia da banda de condução em torno do nível de Fermi. Cada vez que aplicamos a fórmula de recorrência, Eq. (4.5), duas vezes, estamos multiplicando a escala de energia discreta por Λ. Essa mudança na escala, como discutido na seção (3.1), não altera a estrutura de níveis em torno do nível de Fermi, o que leva ao conceito de pontos fixos.

A diferenciação entre os padrões de autovalores para N par e N ímpar, estudada na seção anterior, e o conceito de ponto fixo serão importantes, mais adiante, para determinar em que momentos ocorrem as influências da impureza sobre a banda de condução e vice-versa em Hamiltonianos de sistema com impureza (Nível Ressonante e Modelo de Anderson).

4.3 Nível Ressonante

O Hamiltoniano do Modelo de Nível Ressonante, Eq. (4.2), também pode ser escrito como:

$$H_N^{NR} = u^\dagger \mathcal{H}_N^{NR} u \ ,$$

onde u é o vetor de estados de uma partícula $u = (c_{d\mu}, f_{0\mu}, f_{1\mu}, ..., f_{N\mu})$ e a matriz $\mathcal{H}_N^{NR}$ é real, simétrica, de ordem (N+2) cujos elementos são:

$$\begin{aligned}
(\mathcal{H}_N^{NR})_{1,1} &= \tilde{\varepsilon}_d \Lambda^{\frac{(N+1)}{2}} \\
(\mathcal{H}_N^{NR})_{1,2} = (\mathcal{H}_N^{NR})_{2,1} &= \tilde{\Gamma}^{1/2} \Lambda^{\frac{(N+1)}{2}} \\
(\mathcal{H}_N^{NR})_{n,n+1} = (\mathcal{H}_N^{NR})_{n+1,n} &= \epsilon_n^z \Lambda^{\frac{(N+1)}{2}} \ ,
\end{aligned} \tag{4.7}$$

onde n=2,3,4,...,(N+1); para valores grandes de n, $\epsilon_n^z = \Lambda^{1-z-n/2}$.

Os autovalores de H_N^{NR} são encontrados analiticamente [15]. Para N ímpar são dados por:

$$\lambda_j = \pm \Lambda^{j-z+\gamma_j} \ ,$$

onde j é um inteiro muito maior que um e

$$\gamma_j = \frac{1}{\pi} arctg\{\frac{\Gamma}{A} \frac{2}{(1+\Lambda^{-1})\Lambda^j} \Lambda^{-(N-1)/2}\}$$

com

$$A = \frac{1+\Lambda^{-1}}{1-\Lambda^{-1}} ln(\frac{\Lambda}{2}) \ .$$

Para $N \gg l$, $\gamma_j \to 1/2$ e os autovalores do setor *ímpar* tornam-se:

$$\lambda_j = \pm \Lambda^{j-z+\frac{1}{2}}$$

que são os autovalores $\hat{\eta}_l$ de H_H^{BC} para N grande e *par* ($\lambda_0 = 0$).

Analogamente, para $N \gg j$ e *par* os autovalores $\hat{\lambda}_j$ tornam-se os autovalores η_l de H_N^{BC} para N grande e *ímpar*.

As Tabelas (4.3) e (4.4) e a Figura (4.1) mostram os autovalores de H_N^{NR} para vários autovalores de N par e N ímpar.

Podemos observar, pela mudança dos autovalores com o variação de N (de mesma paridade), que H_N^{NR} não é invariante por mudanças da escala discreta de energia como H_N^{BC} ou, em outras palavras, H_N^{NR} não é ponto fixo de $\mathcal{T}^2$. Isso significa que a impureza quebra a invariância por mudança de escalas de energia da banda de condução. Porém, vemos duas regiões, separadas por uma região de *crossover*, onde os autovalores não dependem de N - os patamares da Figura (4.1). Esses dois patamares constituem dois pontos fixos dos quais H_N^{NR} se aproxima. O desvio de um ponto fixo para o outro é devido ao alargamento Γ do nível da impureza pelos estados da banda de condução; e como Γ é a única energia relevante, existem só esses dois pontos fixos.

O primeiro patamar (até N$\sim$15, no exemplo) é a região de energias bem maiores do que a largura Γ que pode, então, ser desprezada. Portanto, nessa região, a impureza está desacoplada da banda de condução. Então, H_N^{NR} se assemelha a H_N^{BC}, a menos do orbital da impureza. Por isso, o comportamento dos autovalores de H_N^{NR} é próximo do comportamento dos autovalores de H_N^{BC} para N de mesma paridade: $\hat{\lambda}_{j+1} \equiv \hat{\eta}_j$ e $\lambda_j \equiv \eta_j$, desde que $j \gg 1$. Esse ponto fixo é chamado de ponto fixo de orbital livre e denotado por H_{OL}^*.

O *crossover* ocorre quando o sistema está em energias da ordem de Γ ($20 \leq N \leq 28$, aproximadamente).

N	$\hat{\lambda}_1$	$\hat{\lambda}_2$	$\hat{\lambda}_3$	$\hat{\lambda}_4$	$\hat{\lambda}_5$	$\hat{\lambda}_6$	$\hat{\lambda}_7$	$\hat{\lambda}_8$	$\hat{\lambda}_9$...
8	.053	1.698	5.198	15.590	46.767				
10	.091	1.702	5.202	15.594	46.771	140.302			
12	.156	1.715	5.213	15.607	46.783	140.313	420.906		
16	.416	1.855	5.350	15.744	46.921	140.460	421.045	1262.821	3788.151
18	.587	2.097	5.638	16.049	47.231	140.764	421.380	1263.134	...
20	.710	2.467	6.332	16.913	48.147	141.694	422.292	1264.139	...
26	.796	2.969	8.750	24.948	66.784	170.966	456.652	1299.964	...
28	.799	2.988	8.914	26.251	74.843	200.351	512.898	1369.956	...
30	.800	2.994	8.971	26.743	78.752	224.530	601.054	1538.695	...
50	.800	2.997	9.000	27.000	81.000	243.000	728.997	2186.910	...

Tabela 4.3: Autovalores de H_N^{NR}, N par, para $\Lambda = 3$, $\tilde{\varepsilon}_d = 0$ e $V = 0.005$.

N	λ_0	λ_1	λ_2	λ_3	λ_4	λ_5	λ_6	λ_7
7	0	.802	2.999	9.001	27.001			
9	0	.806	3.001	9.003	27.003	81.003		
11	0	.818	3.008	9.011	27.010	81.010	243.010	
15	0	.940	3.087	9.090	27.090	81.095	243.090	729.090
17	0	1.121	3.253	9.266	27.269	81.270	243.284	729.271
19	0	1.367	3.655	9.765	27.798	81.807	243.810	...
27	0	1.690	5.147	15.156	43.211	115.673	296.122	...
29	0	1.694	5.179	15.440	45.467	129.632	347.019	...
31	0	1.695	5.191	15.538	46.320	136.402	388.897	...
51	0	1.696	5.196	15.588	46.765	140.295	420.885	...

Tabela 4.4: Autovalores de H_N^{NR}, N ímpar, para $\Lambda = 3$, $\tilde{\varepsilon}_d = 0$ e $V = 0.005$.

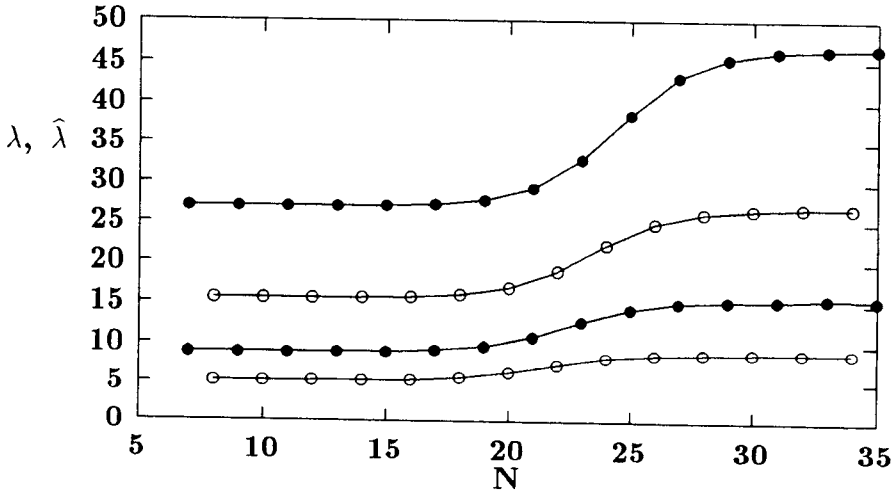

Figura 4.1: Diagrama de fluxo do Modelo de Nível Ressonante mostrando a evolução de dois autovalores $\hat{\lambda}$ para N par (o) e dois autovalores λ para N ímpar (•). A invariância de escala da banda de condução é quebrada pela largura Γ do nível da impureza (no exemplo, ocorre para $N \sim 20$). Observe a troca de paridade entre os pontos fixos. Parâmetros: $\Lambda = 3$, $\tilde{\varepsilon}_d = 0$ e $V = 0.005$.

Com N aumentando, vamos para regiões de energias muito menores que Γ onde é uma boa aproximação considerar $\Gamma = \infty$ ($N \geq 28$). Dessa forma, H_N^{NR} volta a se aproximar de um ponto fixo, porém, com um estado a menos na banda, pois $f_{0\mu}$ se acoplou fortemente a $c_{d\mu}$ deixando os estados de condução defasados de $\pi/2$. Então, o ponto fixo do qual H_N^{NR} se aproxima é H_{N-1}^{BC}. Por isso é que ocorre a "troca" onde autovalores característicos de N par se desviam para autovalores de N ímpar e vice-versa, como pode ser observado nas Tabelas (4.3) e (4.4) e na Figura (4.1). Esse deslocamento dos autovalores caracteriza a defasagem da banda de condução. Esse ponto fixo é chamado de ponto fixo de orbital fortemente acoplado e é denotado por H_{FA}^*.

No capítulo 6, será feita a mesma análise de pontos fixos para o Hamiltoniano de

Anderson.

4.4 Cálculo da Suscetibilidade Magnética e do Calor Específico

Uma vez tendo o espectro de autovalores do Hamiltoniano, podemos calcular suas propriedades termodinâmicas. No caso da suscetibilidade magnética a campo magnético nulo, temos pela definição:

$$\frac{K_B T \chi(T)}{(g\mu_B)^2} = \frac{Tr[S_z^2 exp(-\beta H^{NR})]}{Z} , \tag{4.8}$$

onde g é o fator giromagnético, μ_B é o magneton de Bohr, K_B é a constante de Boltzmann e $\beta = 1/K_B T$. S_z é a componente z do momento angular de spin e $Z = Tr[exp(-\beta H^{NR})]$ é a função de partição. H^{NR}, dado por (4.1), foi diagonalizado na seção anterior.

Em vez de H^{NR}, vamos usar a sua forma diagonal e discretizada análoga à Eq. (4.4) para H_N^{BC}:

$$H_N^{NR} = \sum_j \lambda_j g_{j\mu}^\dagger g_{j\mu} , \tag{4.9}$$

onde λ_j são os autovalores de H_N^{BC} e $g_{j\mu}$ são os operadores que o diagonalizam. $j = -(N+2)/2, -(N+1)/2, ..., -1, 1, ..., (N+1)/2, (N+2)/2$, se N for par ou $j = -(N+1)/2, -N/2, ..., -1, 0, 1, ..., N/2, (N+1)/2$, se N for ímpar.

O Hamiltoniano do Modelo de Nível Ressonante pode ser escrito na forma acima porque é um Hamiltoniano quadrático. Para Hamiltonianos desse tipo, $H = \sum_n E_n g_{n\mu}^\dagger g_{n\mu}$, podemos encontrar a seguinte expressão para a suscetibilidade magnética:

$$\frac{K_B T \chi(T)}{(g\mu_B)^2} = \frac{1}{2} \sum_n \frac{exp(-\beta E_n)}{(1 + exp(-\beta E_n))^2} , \tag{4.10}$$

onde E_n é o espectro de energias de partículas independentes.

Porém, para o cálculo das propriedades termodinâmicas, os autovalores de H_N^{NR}, λ_j (ou $\widehat{\lambda}_j$) encontrados na seção anterior, devem ser multiplicados pelo fator de escala $\frac{(1+\Lambda^{-1})D}{2}\Lambda^{-(N-1)}$ para recuperarmos a escala de energia original de H^{NR}:

$$exp(\beta H^{NR}) = exp[\beta\frac{(1+\Lambda^{-1})}{2}D\Lambda^{-(N-1)}H_N^{NR}] \equiv exp(\overline{\beta}H_N^{NR}).$$

onde definimos:

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

De acordo com Eq. (4.10), temos para a suscetibilidade do sistema banda + impureza o seguinte:

$$\frac{K_B T\chi(T)}{(g\mu_B)^2} = \frac{1}{2}\sum_j \frac{exp(-\overline{\beta}\lambda_j)}{(1+exp(-\overline{\beta}\lambda_j))^2}, \tag{4.11}$$

ou com $\lambda \longrightarrow \widehat{\lambda}_j$ se N for par.

Mas, o que interessa é a contribuição da impureza para a suscetibilidade magnética. Então, é preciso subtrair a suscetibilidade da banda livre. Sendo η_l ($\widehat{\eta}_l$) os autovalores da banda livre par N ímpar (par), temos:

$$\frac{K_B T\chi_{imp}(T)}{(g\mu_B)^2} = \sum_j \frac{exp(-\overline{\beta}\lambda_j)}{(1+exp(-\overline{\beta}\lambda_j))^2} - \sum_l \frac{exp(-\overline{\beta}\eta_l)}{(1+exp(-\overline{\beta}\eta_l))^2} \tag{4.12}$$

ou $\widehat{\lambda}_j$ e $\widehat{\eta}_l$ para N par.

Outra propriedade termodinâmica que calcularemos nesta dissertação é o calor específico é definido por:

$$C(T) = \frac{\partial\langle E\rangle}{\partial T}, \tag{4.13}$$

com

$$\langle E \rangle = \frac{1}{Z} Tr[H^{NR} exp(-\beta H^{NR})] = K_B T^2 \frac{\partial lnZ}{\partial T}.$$

Novamente sendo H^{NR} quadrático, é fácil tomar o traço e encontramos para o calor específico da impureza a seguinte expressão:

$$\frac{C_{imp}(T)}{K_B} = 2\overline{\beta}^2 \{ \sum_j \frac{\lambda_j^2 exp(-\overline{\beta}\lambda_j)}{(1 + exp(-\overline{\beta}\lambda_j))^2} - \sum_l \frac{\eta_l^2 exp(-\overline{\beta}\eta_l)}{(1 + exp(-\overline{\beta}\eta_l))^2} \} . \tag{4.14}$$

Na Figura (4.2) mostramos resultados para $\Lambda = 2.5$ utilizando o procedimento padrão de GRN, ou seja, sem o uso do parâmetro z. Podemos observar que a curva para a suscetibilidade é suave, porém, o calor específico apresenta as oscilações citadas na introdução.

A Figura (4.4) mostra um gráfico de suscetibilidade para um valor maior de Λ, $\Lambda = 9$ e a Figura (4.5) mostra gráficos do calor específico para $\Lambda = 3$ e $\Lambda = 9$ Essas curvas também apresentam oscilações. Por essas figuras, notamos que as oscilações estão ligadas ao parâmetro Λ. Então, podemos dizer que são um efeito indesejável da discretização logarítmica na qual o GRN se baseia. Notamos, também, que dependem da propriedade calculada e se pronunciam muito mais no calor específico.

Portanto, o próximo passo é usar o procedimento *intercalado* para eliminar estas oscilações.

4.4.1 Estudo das oscilações da Suscetibilidade Magnética e do Calor Específico

Seguindo o procedimento descrito na referência [12], mostra-se que para N grande, ou seja, no limite de baixas temperaturas do Modelo de Nível Ressonante, a suscetibilidade

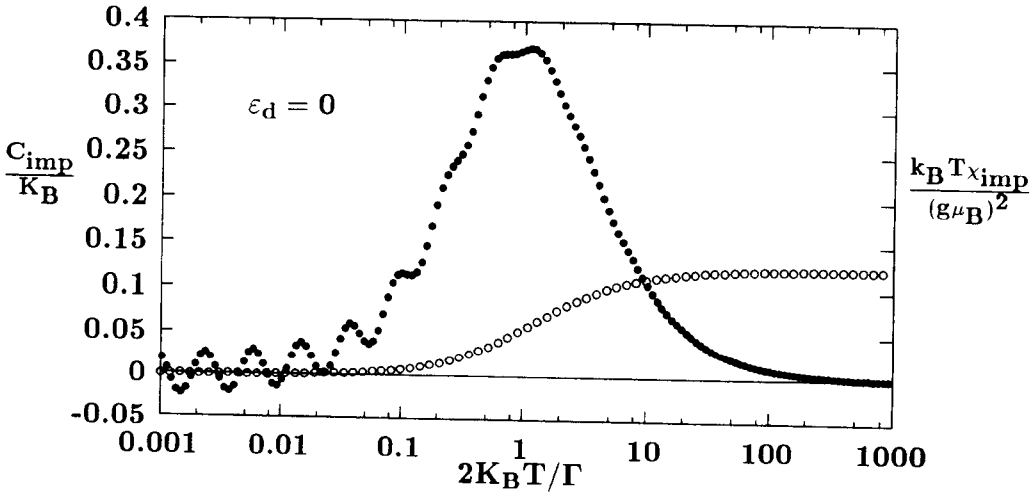

Figura 4.2: Gráficos da suscetibilidade Magnética, indicado por (o) e do calor específico, indicado por (•) para $\Lambda = 2.5$ e $z = 1$ que é o GRN padrão.

magnética pode ser escrita como:

$$\frac{K_B T \chi_{imp}(T)}{(g\mu_B)^2} = \frac{8e^{-\pi^2/ln\Lambda}}{\pi ln^2\Lambda} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{(2k+1)^2}(ln\Lambda cos2\pi w - 2\pi sen2\pi w) \tag{4.15}$$

onde

$$w = z - \frac{1}{2} + \frac{ln(2k+1)\pi}{ln\Lambda} + \frac{ln(K_B T/D_N)}{ln\Lambda}$$

e

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

Esta expressão difere daquela encontrada na referência acima apenas pela amplitude de oscilação. Nossa expressão concorda muito melhor com o cálculo numérico exato.

Nesta expressão podemos observar que as oscilações são inconveniências da discretização logarítmica. Sua amplitude depende fortemente do parâmetro Λ sendo proporcional a $e^{-\pi^2/ln\Lambda}$

que é desprezível para $\Lambda \rightarrow 1$. Seu período é $ln\Lambda$. No caso de Λ próximo de 1, o limite $T\chi_{imp} = 0$ para temperaturas baixas é atingido rapidamente. Mas, para Λ grande, o fator $e^{-\pi^2/ln\Lambda}$ torna-se importante e as oscilações aparecem.

Notamos, também, que a fase das oscilações depende linearmente de z. É nessa dependência de z que se baseia o procedimento *intercalado* pois se calcularmos $\chi_{imp}(T)$ como uma média dos $\chi_{imp}(z,T)$ para valores de z cobrindo toda a banda de condução, ou seja,

$$\chi_{imp}(T) = \int_0^1 \chi_{imp}(z,T)dz \ , \tag{4.16}$$

as oscilações se anulam e obtemos $T\chi_{imp} = 0$ para temperatura baixa.

No caso da suscetibilidade magnética, um cálculo aproximado pela Regra do Trapézio com apenas dois valores de z já fornece resultados suficientemente bons, como mostrou a referência [12]. Os valores de z devem ser escolhidos de forma a termos duas bandas se "intercalando ". Isso se consegue com dois valores quaisquer de z que diferem por $\frac{1}{2}$, como $z_1 = 0.25$ e $z_2 = 0.75$, por exemplo.

A Figura (4.3) ilustra o procedimento e mostra que trabalhar com essas duas bandas discretizadas com Λ equivale, em certo sentido, a trabalhar com uma só mas com parâmetro de discretização $\sqrt{\Lambda}$. Essa é a razão para o nome *intercalado* para esse procedimento.

Dessa maneira, então, no método *intercalado* a suscetibilidade magnética é calculada através de:

$$\chi_{imp}(T) = \frac{\chi_{imp}(z,T) + \chi_{imp}(z+0.5,T)}{2} \ . \tag{4.17}$$

Assim, podemos sobrepor a limitação de se usar valores pequenos de Λ para o cálculo da suscetibilidade magnética usando GRN. Isto torna possível o tratamento por GRN de sistemas de duas impurezas onde valores pequenos de Λ não podem ser usados por causa de tempos de

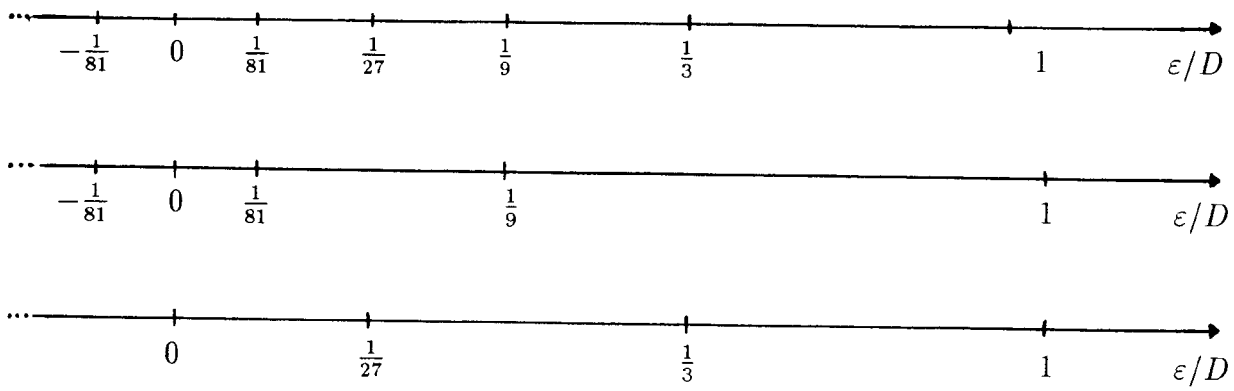

Figura 4.3: Esquema do procedimento *intercalado* mostrando, como exemplo, uma banda discretizada com $\Lambda = 3$ e $z = 1$, uma discretizada com $\Lambda = 9$ e $z = 0.5$ e outra com $\Lambda = 9$ e $z = 1$. Podemos ver que intercalando as duas bandas com $\Lambda = 9$ teremos a banda com $\Lambda = 3$, daí, o nome *intercalado* para o método.

computação muito grandes. Para esses sistemas, cálculos com valores de Λ da ordem de 10 usando o procedimento *intercalado* fornecem resultados muito satisfatórios [12].

O cálculo da suscetibilidade magnética de sistemas de uma impureza não requer valores grandes de Λ, mas para ilustrar o método, a Figura (4.4) mostra o resultado para $\Lambda = 9$ obtido pelo GRN padrão (um único valor de z) [4] e pelo procedimento *intercalado*.

Já o calor específico, como podemos observar na Figura (4.2) para $\Lambda = 2.5$ e (4.5) para $\Lambda = 3$ e $\Lambda = 9$, obtidas pelo GRN padrão, é uma função mais sensível ao parâmetro Λ. Para $\Lambda < 5$, a curva do calor específico pode ser suavizada pelo procedimento *intercalado* usando-se dois valores de z, como podemos observar na Figura (4.6). Mas, nós temos observado que para $\Lambda > 5$, enquanto a suscetibilidade pode ser suavizada com dois valores de z, para o calor específico precisamos usar quatro valores de z, por exemplo,

$$C_{imp}(T) = \frac{C_{imp}(0.125, T) + C_{imp}(0.375, T) + C_{imp}(0.625, T) + C_{imp}(0.875, T)}{4} . \qquad (4.18)$$

A Figura (4.6) mostra a curva do calor específico suavizada com dois valores de z para

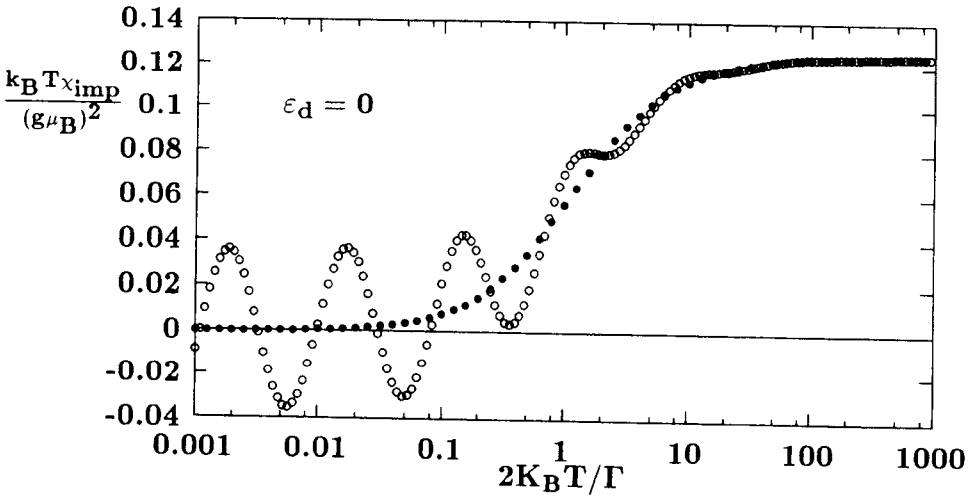

Figura 4.4: Gráficos da suscetibilidade magnética para $\Lambda = 9$. A curva indicada por (o) é obtida com $z = 1$, que é o método de GRN padrão. A curva suave indicada por (•) é obtida usando-se o procedimento *intercalado* com $z_1 = 0.25$ e $z_2 = 0.75$.

$\Lambda = 3$ e com quatro valores de z para $\Lambda = 9$. A linha contínua é o resultado exato calculado por *ansatz* de Bethe [6], mostrando que o método *intercalado* fornece essencialmente resultados exatos. O calor específico na referência [6] é dado por:

$$\frac{C_{imp}(T)}{K_B} = \alpha[1 - \frac{\alpha}{2}\psi'(\frac{1+\alpha}{2})] \quad , \tag{4.19}$$

onde $\alpha = \frac{\Gamma}{2\pi K_B T}$ e ψ é a derivada da função digama.

No capítulo 6 mostraremos, pela primeira vez, que o procedimento *intercalado*, descrito acima para o Modelo de Nível Ressonante, fornece resultados exatos mesmo no contexto do Modelo de Anderson, que inclui correlação eletrônica.

Antes, porém, o próximo capítulo descreve o procedimento de diagonalização iterativa

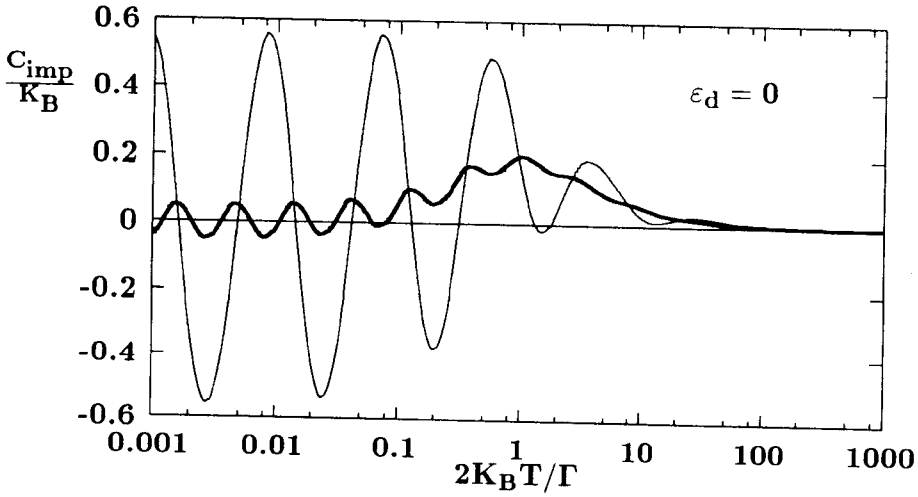

Figura 4.5: Gráficos do calor específico obtido por GRN padrão ($z = 1$). A linha mais grossa foi obtida para $\Lambda = 3$ e a mais fina, $\Lambda = 9$. Como se vê, as oscilações no calor específico são muito maiores do que na suscetibilidade magnética (ver figura anterior).

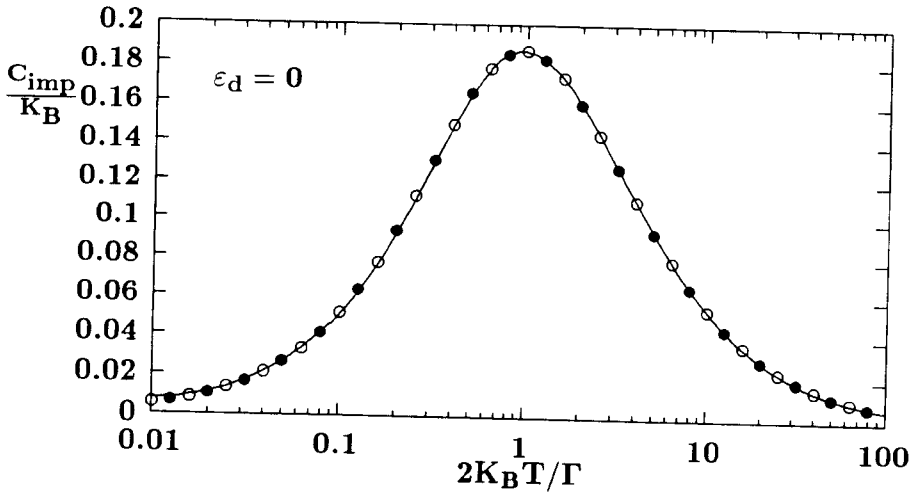

Figura 4.6: Gráficos do calor específico obtidos por GRN generalizado e procedimento *intercalado* para $\Lambda = 3$, indicado por (•) e para $\Lambda = 9$, indicado por (o). Para $\Lambda = 3$, foram usados $z_1 = 0.25$ e $z_2 = 0.75$ e para $\Lambda = 9$, foram usados $z_1 = 0.125$, $z_2 = 0.375$, $z_3 = 0.625$ e $z_4 = 0.875$. A linha cheia representa a curva universal exata dada pela equação (4.18).

necessário ao caso de Hamiltonianos não quadráticos. O leitor interessado na discussão dos resultados poderá ir diretamente ao capítulo 6 sem prejuízo de compreensão.

Capítulo 5

Diagonalização Iterativa

O espectro do Hamiltoniano de Anderson que vamos precisar para calcular as propriedades termodinâmicas não pode ser obtido pelo procedimento simples usado no Modelo de Nível Ressonante. Apenas Hamiltonianos quadráticos, como H^{NR}, podem ser resolvidos por aquele procedimento. Para Hamiltonianos não quadráticos, como o de Anderson, não podemos usar uma base de estados de uma partícula como fizemos naquele modelo.

Aqui usaremos o método de GRN onde a chave para resolver o problema é a relação de recorrência, Eq. (3.16), através de um processo de diagonalização iterativo.

Neste capítulo, vamos descrever o processo iterativo que diagonaliza o Hamiltoniano de Anderson simétrico.

A base de estados de muitos corpos de H_{N+1} será obtida dos autovetores de H_N da seguinte forma: a partir de $|\Omega\rangle$, um autoestado de H_N, construímos quatro estados de base para H_{N+1}:

$$
\begin{aligned}
&|\Omega\rangle \quad , \\
f^{\dagger}_{(N+1)\uparrow} \quad &|\Omega\rangle \quad , \\
f^{\dagger}_{(N+1)\downarrow} \quad &|\Omega\rangle \quad \text{e} \\
f^{\dagger}_{(N+1)\uparrow} f^{\dagger}_{(N+1)\downarrow} \quad &|\Omega\rangle \quad .
\end{aligned}
$$

H_N possui 2(N+2) operadores de férmions que podem estar vazios ou ocupados dando

$(2^{2(N+2)})$ autovetores. Os $(4 \cdot 2^{2(n+2)})$ vetores gerados pelo procedimento acima para a base de H_{N+1} também são autovetores de H_N.

Os elementos de matriz de H_{N+1} são obtidos usando-se a relação de recorrência, Eq. (3.16). Chamando de $\mathcal{O}^\dagger$ qualquer um dos operadores I, $f^\dagger_{(N+1)\uparrow}$, $f^\dagger_{(N+1)\downarrow}$ ou $f^\dagger_{(N+1)\uparrow}f^\dagger_{(N+1)\downarrow}$, os elementos de matriz são:

$$\begin{aligned}\langle\Omega'|\mathcal{O}'H_{N+1}\mathcal{O}^\dagger|\Omega\rangle &= \Lambda^{1/2}E_N(\Omega)\delta_{\Omega\Omega'}\delta_{\mathcal{O}\mathcal{O}'} + \\ +\xi^z_N[\langle\Omega'|f^\dagger_{n\mu}|\Omega\rangle\langle\emptyset|\mathcal{O}'f_{(N+1)\mu}\mathcal{O}^\dagger|\emptyset\rangle &+ \langle\emptyset|\mathcal{O}'f^\dagger_{(N+1)\mu}\mathcal{O}^\dagger|\emptyset\rangle\langle\Omega'|f_{n\mu}|\Omega\rangle]\ , \end{aligned} \tag{5.1}$$

O elemento $\langle\emptyset|\mathcal{O}'f_{(N+1)\mu}\mathcal{O}^\dagger|\emptyset\rangle$ (ou $\langle\emptyset|\mathcal{O}'f^\dagger_{(N+1)\mu}\mathcal{O}^\dagger|\emptyset\rangle$) vale 1 ou 0. Por exemplo, se $\mathcal{O}' = f_{(N+1)\uparrow}$ e $\mathcal{O}^\dagger = f^\dagger_{(N+1)\uparrow}f^\dagger_{(N+1)\downarrow}$, $\langle\emptyset|f_{(N+1)\uparrow}f_{(N+1)\uparrow}f^\dagger_{(N+1)\uparrow}f^\dagger_{(N+1)\downarrow}|\emptyset\rangle = 1$.

Conhecendo $E_N(\Omega)$, os autovalores de H_N, e os elementos $\langle\Omega'|f^\dagger_{N\mu}|\Omega\rangle$ (ou $\langle\Omega'|f_{N\mu}|\Omega\rangle$), encontramos H_{N+1} que diagonalizamos e, em seguida, passamos à iteração (N+2) repetindo o procedimento.

Vamos tomar como Hamiltoniano inicial

$$H_{-1} = \Lambda^{-1}(\tilde{\varepsilon}_d c^\dagger_{d\mu}c_{d\mu} + \tilde{U}c^\dagger_{d\uparrow}c_{d\uparrow}c^\dagger_{d\downarrow}c_{d\downarrow})$$

que se refere apenas à impureza, possuindo, então, os operadores $c_{d\uparrow}$ e $c_{d\downarrow}$.

Seus autovetores são : $|\emptyset\rangle$, $c^\dagger_{d\uparrow}|\emptyset\rangle$, $c^\dagger_{d\downarrow}|\emptyset\rangle$ e $c^\dagger_{d\uparrow}c^\dagger_{d\downarrow}|\emptyset\rangle$ (ver Tabela (5.2)) .

O próximo Hamiltoniano,

$$H_0 = \Lambda^{-1/2}[\tilde{\varepsilon}_d c^\dagger_{d\mu}c_{d\mu} + \tilde{U}c^\dagger_{d\uparrow}c_{d\uparrow}c^\dagger_{d\downarrow}c_{d\downarrow} + (\tilde{\Gamma})^{1/2}(f^\dagger_{0\mu}c_{d\mu} + c^\dagger_{d\mu}f_{0\mu})]\ ,$$

inclue a impureza e um nível da banda de condução, ou seja, além de $c_{d\uparrow}$ e $c_{d\downarrow}$, possui os operadores $f_{0\uparrow}$ e $f_{0\downarrow}$ a mais. Sua base terá 16 estados ($2^{2((N=0)+2)} = 16$), onde cada um dos 4 autoestados de H_{-1} gera 4 desses 16 estados.

O próximo, H_1, terá 64 estados de base e o próximo, H_2, 256, etc.

Porém, H_N possui simetrias que facilitam ou até viabilizam a diagonalização dessas matrizes. Usaremos duas quantidades conservadas por H_N: o spin e a carga axial. O spin, em termos dos f_n, é dado por:

$$\begin{aligned} S_N^+ &= \sum_n f_{n\uparrow}^\dagger f_{n\downarrow} + c_{d\uparrow}^\dagger c_{d\downarrow} \quad , \\ S_N^- &= \sum_n f_{n\downarrow}^\dagger f_{n\uparrow} + c_{d\downarrow}^\dagger c_{d\uparrow} \quad \text{e} \\ S_N^z &= \frac{1}{2}\sum_n (f_{n\uparrow}^\dagger f_{n\uparrow} - f_{n\downarrow}^\dagger f_{n\downarrow}) + \frac{1}{2}(c_{d\uparrow}^\dagger - c_{d\downarrow}^\dagger c_{d\downarrow}) \, . \end{aligned} \tag{5.2}$$

A carga axial [17], primeiramente definida no contexto Modelo de Kondo de duas impurezas, é aqui, no Modelo de Anderson, definida por

$$\begin{aligned} J_N^+ &= \sum_n (-1)^n f_{n\uparrow}^\dagger f_{n\downarrow}^\dagger - c_{d\uparrow}^\dagger c_{d\downarrow}^\dagger \quad , \\ J_N^- &= \sum_n (-1)^n f_{n\downarrow} f_{n\uparrow} - c_{d\downarrow} c_{d\uparrow} \quad \text{e} \\ J_N^z &= \frac{1}{2}\sum_n (f_{n\uparrow}^\dagger f_{n\uparrow} - f_{n\downarrow}^\dagger f_{n\downarrow} - 1) - \frac{1}{2}(c_{d\uparrow}^\dagger c_{d\uparrow} - c_{d\downarrow}^\dagger c_{d\downarrow} - 1) \, . \end{aligned} \tag{5.3}$$

A carga axial possui as mesmas relações de comutação do spin. J_n^z fornece a carga do nível n o que justifica a denominação do operador $\vec{J}$ de carga axial.

A conservação da carga axial se deve à simetria partícula-buraco que significa que um nível duplamente ocupado tem a mesma energia que um nível vazio. A distinção entre os dois é feita pelo operador J^z. Isto é análogo à situação em que um nível ocupado com um elétron com spin para cima e um nível ocupado com um elétron com spin para baixo têm a mesma energia, a não ser que haja um campo magnético aplicado.

Como H_N comuta com S_N^2, S_{Nz}, J_N^2 e J_{Nz}, seus estados serão denominados pelos números quânticos referentes a esses operadores. Subespaços com s, s_z, j, j_z diferentes são independentes e, portanto, podem ser diagonalizados separadamente.

O número quântico j_z diz se um nível está vazio ($j_z = -\frac{1}{2}$) ou duplamente ocupado ($j_z = \frac{1}{2}$), e como já foi dito, a energia é a mesma e, portanto, não precisamos trabalhar com j_z. O mesmo vale para s_z. Podemos evitar o uso das componentes z através do teorema de Wigner-Eckart.

Os autoestados de H_N serão representados por $|j, s, \omega\rangle_N$, onde ω distingue os autovetores do subespaço (j,s). Os estados da base de H_{N+1} serão denotados por $|j, s, r; i\rangle_{N+1}$, onde r distingue os estados de base do mesmo subespaço e i=1,2,3 ou 4 indica a forma pela qual o estado foi construído, o que será descrito em seguida. Os estados construídos pelo procedimento acima, operando com $\mathcal{O}^\dagger$ sobre os autoestados da iteração anterior, serão, agora, denotados por:

$$\begin{aligned}
|\Omega\rangle_N \equiv |j, j_z, s, s_z, r\rangle_N &\equiv |j, j_z, s, s_z, r; 0\rangle_N \ , \\
f^\dagger_{N\uparrow}|\Omega\rangle_N \equiv f^\dagger_{N\uparrow}|j, j_z, s, s_z, r\rangle_N &\equiv |j, j_z, s, s_z, r; \uparrow\rangle_N \ , \\
f^\dagger_{N\downarrow}|\Omega\rangle_N \equiv f^\dagger_{N\downarrow}|j, j_z, s, s_z, r\rangle_N &\equiv |j, j_z, s, s_z, r; \downarrow\rangle_N \ , \\
f^\dagger_{N\uparrow} f^\dagger_{N\downarrow}|\Omega\rangle_N \equiv f^\dagger_{N\uparrow} f^\dagger_{N\downarrow}|j, j_z, s, s_z, r\rangle_N &\equiv |j, j_z, s, s_z, r; \uparrow\downarrow\rangle_N \ . \qquad (5.4)
\end{aligned}$$

Os estados da base de H_{N+1} serão combinações lineares dos estados acima cujos coeficientes são os coeficientes de Clebsh-Gordan para a soma de um spin qualquer com um spin 1/2: de uma iteração para outra, ou somamos um spin 1/2 (o segundo e o terceiro casos acima) ou uma carga axial 1/2 (o primeiro e o último casos acima). Usando Clebsh-Gordan, obtemos estados com números quânticos bem definidos que são autoestados de J^2, J_z, S^2, S_z e H_N. As combinações são:

$$\begin{aligned}
|j, j_z, s, s_z, r; 1\rangle_{N+1} &= (-1)^{N+1}\left(\frac{j + j_z}{2j}\right)^{1/2}|j - \frac{1}{2}, j_z - \frac{1}{2}, s, s_z, r; \uparrow\downarrow\rangle_N \\
&+ \left(\frac{j - j_z}{2j}\right)^{1/2}|j - \frac{1}{2}, j_z + \frac{1}{2}, s, s_z, r; 0\rangle_N \ , \\
|j, j_z, s, s_z, r; 2\rangle_{N+1} &= \left(\frac{s + s_z}{2s}\right)^{1/2}|j, j_z, s - \frac{1}{2}, s_z - \frac{1}{2}, r; \uparrow\rangle_N \\
&+ \left(\frac{s - s_z}{2s}\right)^{1/2}|j, j_z, s - \frac{1}{2}, s_z - \frac{1}{2}, r; \downarrow\rangle_N \ ,
\end{aligned}$$

SERVIÇO DE BIBLIOTECA E INFORMAÇÃO

$$
\begin{aligned}
|j,j_z,s,s_z,r;3\rangle_{N+1} &= -(\frac{s-s_z+1}{2s+2})^{1/2}|j,j_z,s+\frac{1}{2},s_z-\frac{1}{2},r;\uparrow\rangle_N \\
&+ (\frac{s+s_z+1}{2s+2})^{1/2}|j,j_z,s+\frac{1}{2},s_z+\frac{1}{2},r;\downarrow\rangle_N \ ,
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
|j,j_z,s,s_z,r;4\rangle_{N+1} &= -(-1)^{N+1}(\frac{j-j_z+1}{2j+2})^{1/2}|j+\frac{1}{2},j_z-\frac{1}{2},s,s_z,r;\uparrow\downarrow\rangle_N \\
&+ [\frac{j+j_z+1}{2j+2}]^{1/2}|j+\frac{1}{2},j_z+\frac{1}{2},s,s_z,r;\uparrow\downarrow\rangle_N \ . \qquad (5.5)
\end{aligned}
$$

A Tabela (5.2) mostra a base de estados de H_0 construída a partir dos autoestados de H_{-1}, como exemplo. Observe que cada vetor da base já é autoestado dos operadores J^2, J_z, S^2 e S_z por construção.

Construída a base, passamos ao cálculo dos elementos de matriz de H_{N+1} usando a fórmula (3.16). Os termos diagonais são dados por:

$$
\begin{aligned}
{}_{N+1}\langle j,s,r,1|H_N|j,s,r;1\rangle_{N+1} &= E_N(j-\frac{1}{2},s,r) \ , \\
{}_{N+1}\langle j,s,r;2|H_N|j,s,r;2\rangle_{N+1} &= E_N(j,s-\frac{1}{2},r) \ , \\
{}_{N+1}\langle j,s,r;3|H_N|j,s,r;3\rangle_{N+1} &= E_N(j,s+\frac{1}{2},r) \ , \\
{}_{N+1}\langle j,s,r;4|H_N|j,s,r;4\rangle_{N+1} &= E_N(j+\frac{1}{2},s,r) \ . \qquad (5.6)
\end{aligned}
$$

onde suprimimos as componentes z, já que os E_N não dependem delas.

Já para os termos não diagonais, de acordo com a Eq. (3.16), precisamos calcular o elemento de matriz do operador $H_{NI} = \xi_N^z[f_{N\mu}^\dagger f_{(N+1)\mu} + f_{(N+1)\mu}^\dagger f_{N\mu}]$. Para eliminar as componentes j_z e s_z, faremos uso do Teorema de Wigner-Eckart. No apêndice A, mostramos que $f_{N\mu}^\dagger$ e $(-1)^N(-2\mu)f_{N\mu}$ são as componentes de um tensor T. Então, os termos não diagonais, de acordo com a Eq. (5.1), são proporcionais aos seguintes elementos:

$$
\langle j',j_z',s',s_z'|f_{N\mu}^\dagger|j,j_z,s,s_z\rangle_N = \langle j,j_z;\frac{1}{2},\frac{1}{2}|j',j_z'\rangle\langle s,s_z;\frac{1}{2}-\mu|s',s_z'\rangle\langle j',s'||T||j's\rangle \qquad (5.7)
$$

e

$$\langle j', j'_z, s', s'_z|(-1)^N(-2\mu)f^\dagger_{N\mu}|j, j_z, s, s_z\rangle = \langle j, j_z; \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}|j', j'_z\rangle\langle s, s_z; \frac{1}{2}-\mu|s', s'_z\rangle\langle j', s'||T||j's\rangle \quad (5.8)$$

onde $\langle j', s'||T||j, s\rangle$ são os elementos de matriz invariantes e os dois termos que os multiplicam são coeficientes de Clebsh-Gordan.

Para os elementos de matriz dos operadores $f_{N+1\mu}$ e $f^\dagger_{N+1\mu}$ encontramos 0 ou 1 ,como já vimos acima, dependendo das combinações i/i'.Substituindo os coeficientes de Clebsch-Gordan e encontrando as combinações i/i' diferentes de zero, obtemos os seguintes elementos diferentes de zero:

$$\begin{aligned}
{}_{N+1}\langle j, j_z, s, s_z, r'; 1|H_{NI}|j, j_z, s, s_z, r; 2\rangle_{N+1} &= -(\frac{2j}{2j+1})^{1/2}\langle j-\frac{1}{2}, s, r'||T_N||j, s-\frac{1}{2}, r\rangle \quad , \\
{}_{N+1}\langle j, j_z, s, s_z, r'; 1|H_{NI}|j, j_z, s, s_z, r; 3\rangle_{N+1} &= -(\frac{2j}{2j+1})^{1/2}\langle j-\frac{1}{2}, s, r'||T_N||j, s+\frac{1}{2}, r\rangle \quad , \\
{}_{N+1}\langle j, j_z, s, s_z, r'; 2|H_{NI}|j, j_z, s, s_z, r; 4\rangle_{N+1} &= (-1)(-1)^N(\frac{2s}{2s+1})^{1/2}\langle j, s-\frac{1}{2}, r'||T_N||j+\frac{1}{2}, s, r\rangle \quad , \\
{}_{N+1}\langle j, j_z, s, s_z, r'; 3|H_{NI}|j, j_z, s, s_z, r; 4\rangle_{N+1} &= (-1)^N(\frac{2s+2}{2s+1})^{1/2}\langle j, s+\frac{1}{2}, r'||T_N||j+\frac{1}{2}, s, r\rangle \ .
\end{aligned}$$

Portanto, conhecendo os autovalores $E_N(j, s, r)$ e os elementos de matriz invariantes $\langle j-\frac{1}{2}, s\pm\frac{1}{2}, r'||T_N||j, s, r\rangle$, encontramos a matriz H_{N+1}. Note que não são envolvidas as componentes j_z e s_z. Diagonalizando H_{N+1} encontramos os autovalores $E_{N+1}(j, s, \omega)$ e os autoestados $|j, s, \omega\rangle_{N+1}$ que são combinações lineares dos vetores da base:

$$|j, s, \omega\rangle_{N+1} = \sum_r U_{j,s}(r, \omega)|j, s, r, i\rangle \ ,$$

onde U é uma matriz ortogonal, cujos coeficientes são os autovetores de H_{N+1}.

Para a próxima iteração, (N+2), já temos os autovetores e os autovalores de H_{N+1}: $|j, s, \omega\rangle_{N+1}$ e $E_{N+1}(j, s, \omega)$. Vamos precisar, também, dos elementos de matriz invariantes $\langle j-\frac{1}{2}, s\pm\frac{1}{2}, \omega'||T_{N+1}||j, s, \omega\rangle$, que devem ser calculados nesse momento do processo, antes de entrarmos na próxima iteração. De acordo com a equação acima são dados por:

$$
\begin{aligned}
|1,-1,0,0,1;1\rangle_0 &\equiv |\emptyset\rangle_{-1} \\
|\tfrac{1}{2},\tfrac{-1}{2},\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2},1;1\rangle_0 &\equiv c^\dagger_{d\uparrow}|\emptyset\rangle_{-1} \\
|\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2},2;2\rangle_0 &\equiv f^\dagger_{0\uparrow}|\emptyset\rangle_{-1} \\
|\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2},\tfrac{-1}{2},1;1\rangle_0 &\equiv c^\dagger_{d\downarrow}|\emptyset\rangle_{-1} \\
|\tfrac{1}{2},\tfrac{-1}{2},\tfrac{1}{2},\tfrac{-1}{2},2;2\rangle_0 &\equiv f^\dagger_{0\downarrow}|\emptyset\rangle_{-1} \\
|0,0,1,1,1;2\rangle_0 &\equiv f^\dagger_{0\uparrow}c^\dagger_{d\uparrow}|\emptyset\rangle_{-1} \\
|1,0,0,0,1;1\rangle_0 &\equiv \frac{1}{\sqrt{2}}(c^\dagger_{d\uparrow}c^\dagger_{d\downarrow}|\emptyset\rangle_{-1} + f^\dagger_{0\uparrow}f^\dagger_{0\downarrow}|\emptyset\rangle_{-1}) \\
|0,0,1,0,1;2\rangle_0 &\equiv \frac{1}{\sqrt{2}}(f^\dagger_{0\downarrow}c^\dagger_{d\uparrow}|\emptyset\rangle_{-1} + f^\dagger_{0\uparrow}c^\dagger_{d\downarrow}|\emptyset\rangle_{-1}) \\
|0,0,0,0,1;4\rangle_0 &\equiv \frac{1}{\sqrt{2}}(c^\dagger_{d\uparrow}c^\dagger_{d\downarrow}|\emptyset\rangle_{-1} - f^\dagger_{0\uparrow}f^\dagger_{0\downarrow}|\emptyset\rangle_{-1}) \\
|0,0,0,0,2;3\rangle_0 &\equiv \frac{1}{\sqrt{2}}(f^\dagger_{0\downarrow}c^\dagger_{d\uparrow}|\emptyset\rangle_{-1} - f^\dagger_{0\uparrow}c^\dagger_{d\downarrow}|\emptyset\rangle_{-1}) \\
|0,0,1,-1,1;2\rangle_0 &\equiv f^\dagger_{0\downarrow}c^\dagger_{d\downarrow}|\emptyset\rangle_{-1} \\
|\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2},1;2\rangle_0 &\equiv f^\dagger_{0\uparrow}c^\dagger_{d\uparrow}c^\dagger_{d\downarrow}|\emptyset\rangle_{-1} \\
|\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2},2;1\rangle_0 &\equiv f^\dagger_{0\uparrow}f^\dagger_{0\downarrow}c^\dagger_{d\uparrow}|\emptyset\rangle_{-1} \\
|\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2},\tfrac{-1}{2},1;2\rangle_0 &\equiv f^\dagger_{0\uparrow}c^\dagger_{c\uparrow}c^\dagger_{d\downarrow}|\emptyset\rangle_{-1} \\
|\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2},\tfrac{-1}{2},2;1\rangle_0 &\equiv f^\dagger_{0\uparrow}f^\dagger_{0\downarrow}c^\dagger_{d\downarrow}|\emptyset\rangle_{-1} \\
|1,1,0,0,1;1\rangle_0 &\equiv f^\dagger_{0\uparrow}f^\dagger_{0\downarrow}c^\dagger_{d\uparrow}c^\dagger_{d\downarrow}|\emptyset\rangle_{-1}
\end{aligned}
\tag{5.9}
$$

Tabela 5.1: 16 estados de base $|j, j_z, s, s_z, r; i\rangle_0$ do Hamiltoniano H_0, construídos a partir dos autoestados de H_{-1}.

autovetores	autovetores incluindo componentes j_z e s_z	autovalores
$\|\frac{1}{2},0,1\rangle_{-1}$	$\|\frac{1}{2},-\frac{1}{2},0,0,1\rangle_{-1} \equiv \|\emptyset\rangle_{-1}$	0
	$\|\frac{1}{2},\frac{1}{2},0,0,1\rangle_{-1} \equiv c^{\dagger}_{d\uparrow}c^{\dagger}_{d\downarrow}\|\emptyset\rangle_{-1}$	
$\|0,\frac{1}{2},1\rangle_{-1}$	$\|0,0,\frac{1}{2},\frac{1}{2},1\rangle_{-1} \equiv c^{\dagger}_{d\uparrow}\|\emptyset\rangle_{-1}$	$\Lambda^{-1}\tilde{\varepsilon}_d$
	$\|0,0,\frac{1}{2},-\frac{1}{2},1\rangle_{-1} \equiv c^{\dagger}_{d\downarrow}\|\emptyset\rangle_{-1}$	

Tabela 5.2: Autovalores e autovetores de $H_{-1} = \Lambda^{-1}(\tilde{\varepsilon}_d c^{\dagger}_{d\mu}c_{d\mu} + \tilde{U}c^{\dagger}_{d\uparrow}c_{d\uparrow}c^{\dagger}_{d\downarrow}c_{d\downarrow})$.

$$\langle j',s',\omega'||T_{N+1}||j,s,\omega\rangle = \sum_r U_{j',s'}(r,\omega')U_{j,s}(r,\omega)\langle j',s',r',i'||T_{N+1}||j,s,r,i\rangle \ , \tag{5.10}$$

Os elementos $\langle j',s',r',i'||T_{N+1}||j,s,r,i\rangle$ diferentes de zero são:

$$\begin{aligned}
\langle j-\frac{1}{2},s+\frac{1}{2},r,2||T_{N+1}||j,s,r,1\rangle &= -(\frac{2j+1}{2j})^{1/2} \ , \\
\langle j-\frac{1}{2},s-\frac{1}{2},r,3||T_{N+1}||j,s,r,1\rangle &= -(\frac{2j+1}{2j})^{1/2} \ , \\
\langle j-\frac{1}{2},s-\frac{1}{2},r,4||T_{N+1}||j,s,r,2\rangle &= (-1)(-1)^{N+1}(\frac{2s+1}{2s})^{1/2} \ , \\
\langle j-\frac{1}{2},s+\frac{1}{2},r,4||T_{N+1}||j,s,r,3\rangle &= (-1)^{N+1}(\frac{2s+1}{2s+2})^{1/2} \ ,
\end{aligned} \tag{5.11}$$

Então:

$$\langle j',s',\omega'||T_{N+1}||j,s,\omega\rangle = \begin{cases} -(\frac{2j+1}{2j})^{1/2}\sum_r U_{j',s'}(r,\omega')U_{j,s}(r,\omega) & \text{para } i=1; \\ \text{se } i'=2,\ s'=s+\frac{1}{2} \text{ e se } i'=3,\ s'=s-\frac{1}{2} & \text{e} \\ -(-1)^{N+1}(\frac{2s+1}{2s'+1})^{1/2}\sum_r U_{j',s'}(r,\omega')U_{j,s}(r,\omega) & \text{para } i'=4\ ; \\ \text{se } i=2,\ s'=s-\frac{1}{2} \text{ e se } i=3,\ s'=s+\frac{1}{2} & \end{cases} \ . \tag{5.12}$$

Como exemplo, vamos construir H_0 a partir de H_{-1}. A Tabela (5.2) mostra os autovetores e autovalores de H_{-1}. O elemento de matriz invariante da iteração (N=-1) é

$$\langle 0,\frac{1}{2}||T_{-1}||\frac{1}{2},0\rangle = -\sqrt{2}$$

A primeira coluna da Tabela (5.3) mostra a base de estados de H_0 construída a partir dos autoestados de H_{-1} através das relações (5.5) sem levar em conta as componentes j_z e s_z.

A matriz H_0 é construída através das fórmulas (5.6) e (5.10):

$$H_0 = \Lambda^{1/2} \begin{pmatrix} \tilde{\varepsilon}_d & 2\tilde{\Gamma}^{1/2} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 2\tilde{\Gamma}^{1/2} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \tilde{\varepsilon}_d & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \tilde{\varepsilon}_d & \tilde{\Gamma}^{1/2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \tilde{\Gamma}^{1/2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{matrix} |0,0,1;3\rangle \\ |0,0,2;4\rangle \\ |0,1,1;2\rangle \\ |\frac{1}{2},\frac{1}{2},1;1\rangle \\ |\frac{1}{2},\frac{1}{2},2;2\rangle \\ |1,0,1;1\rangle \end{matrix}$$

Por exemplo,

$$\begin{aligned} \langle 0,0,1;3|H_0|0,0,1;3\rangle &= \Lambda^{1/2}E_{-1}(0,\frac{1}{2},1) = \Lambda^{-1/2}\tilde{\varepsilon}_d. \\ \langle 0,0,1;3|H_0|0,0,2;4\rangle &= \Lambda^{-1/2}\tilde{\Gamma}^{1/2}(-1)(\frac{1}{2})^{1/2}\langle 0,\frac{1}{2}||T_{-1}||\frac{1}{2}\rangle \\ &= \Lambda^{-1/2}\tilde{\Gamma}^{1/2}(-\sqrt{2})(-\sqrt{2}) = 2\Lambda^{-1/2}\tilde{\Gamma}^{1/2}. \end{aligned}$$

Temos uma matriz 6x6 para diagonalizar, ao invés de uma 16x16 como seria utilizando a Tabela (5.1). E como se vê, a conservação da carga axial e do spin requer somente que se diagonalize duas matrizes 2x2 e duas 1x1. As duas matrizes 2x2 diagonalizadas são as matrizes $U_{00}(r,\omega)$ e $U_{\frac{1}{2}\frac{1}{2}}(r,\omega)$. Os autoestados e os autovalores são mostrados na Tabela (5.3). Agora, devemos calcular os elementos de matriz invariantes de H_0 usando Eq. (5.12). Depois, passamos para a iteração N=1 que inclue os operadores $f^{\dagger}_{1\mu}$ e $f_{1\mu}$, repetindo o processo.

Começamos com $j = 0$ e $s = 0$ e vamos incrementando s de 1/2 até seu último valor; depois incrementamos j e repetimos até o último valor de j. Por fim, ainda é preciso considerar que o número de estados cresce exponencialmente com N levando a matrizes muito grandes. Por isso, de uma iteração para outra, abandonaremos os autoestados cujas energias sejam maiores que um determinado limite E_{max} muito maior que as energias de interesse.

No próximo capítulo, vamos calcular a suscetibilidade magnética e o calor específico para o Modelo de Anderson simétrico.

base	autoestados	autovalores
$\|\frac{1}{2},\frac{1}{2},1;1\rangle_0$	$\|\frac{1}{2},\frac{1}{2},1\rangle_0 = U_{\frac{1}{2},\frac{1}{2}}(1,1)\|\frac{1}{2},\frac{1}{2},1;1\rangle_0 + U_{\frac{1}{2},\frac{1}{2}}(2,1)\|\frac{1}{2},\frac{1}{2},2;2\rangle_0$	$\frac{\tilde{\varepsilon}_d}{2\Lambda^{1/2}} + (\frac{\tilde{\varepsilon}_d^2+4\Gamma}{4\Lambda})^{1/2}$
$\|0,1,1;2\rangle_0$	$\|0,1,1\rangle_0$	$\frac{\tilde{\varepsilon}_d}{\Lambda^{1/2}}$
$\|0,0,1;3\rangle_0$	$\|0,0,1\rangle_0 = U_{0,0}(1,1)\|0,0,1;3\rangle_0 + U_{0,0}(2,1)\|0,0,2;4\rangle_0$	$\frac{\tilde{\varepsilon}_d}{2\Lambda^{1/2}} + (\frac{\tilde{\varepsilon}_d^2+16\Gamma}{4\Lambda})^{1/2}$
$\|1,0,1;1\rangle_0$	$\|1,0,1\rangle_0$	0
$\|\frac{1}{2},\frac{1}{2},2;2\rangle_0$	$\|\frac{1}{2},\frac{1}{2},2\rangle_0 = U_{\frac{1}{2},\frac{1}{2}}(1,2)\|\frac{1}{2},\frac{1}{2},1;1\rangle_0 + U_{\frac{1}{2},\frac{1}{2}}(2,2)\|\frac{1}{2},\frac{1}{2},2;2\rangle_0$	$\frac{\tilde{\varepsilon}_d}{2\Lambda^{1/2}} - (\frac{\tilde{\varepsilon}_d^2+4\Gamma}{4\Lambda})^{1/2}$
$\|0,0,2;4\rangle_0$	$\|0,0,1\rangle_0 = U_{0,0}(1,2)\|0,0,1;3\rangle_0 + U_{0,0}(2,2)\|0,0,2;4\rangle_0$	$\frac{\tilde{\varepsilon}_d}{2\Lambda^{1/2}} - (\frac{\tilde{\varepsilon}_d^2+16\Gamma}{4\Lambda})^{1/2}$

Tabela 5.3: Base de estados, autoestados e autovalores de H_0, onde as componentes j_z e s_z não aparecem devido ao uso de elementos de matriz invariantes.

Capítulo 6

Cálculo da suscetibilidade magnética e do calor específico do Modelo de Anderson simétrico

Os resultados desse capítulo foram obtidos pelo GRN generalizado usando a simetria de carga axial e o procedimento *intercalado* já discutidos nos capítulos anteriores.

Dividimos as discussões em duas partes: a primeira apresenta os resultados já bem conhecidos da suscetibilidade magnética e a segunda apresenta os resultados que obtivemos para o calor específico incluindo comparações com resultados analíticos e curvas universais encontrados na literatura.

6.1 Suscetibilidade Magnética

Já usamos no capítulo 4 a seguinte expressão para a suscetibilidade:

$$\frac{K_B T \chi}{(g\mu_B)^2} = \langle S_z^2 \rangle = \frac{Tr[S_z^2 exp(-\beta H_A)]}{Tr[exp(-\beta H_A)]} \cong \frac{Tr[S_z^2 exp(-\overline{\beta}_N H_N)]}{Tr[exp(-\overline{\beta}_N H_N)]} \tag{6.1}$$

onde H_A é dado pela Eq. (2.1) e H_N é dado pela Eq. (3.14). A aproximação acima, truncar H_A transformando-o em H_N, como vimos na seção 3.1, pode ser feita desde que N seja escolhido segundo a condição (3.12). $\overline{\beta}_N$ foi definido para se recuperar a escala original de energia de H_A e é dado por:

$$\overline{\beta}_N = \beta \frac{(1+\Lambda)D}{2} \Lambda^{-(N+1)/2} . \tag{6.2}$$

Se escolhermos um número $\overline{\beta}$ tal que $\overline{\beta}_N = \overline{\beta}$ onde $\overline{\beta}$ é fixo e apropriadamente pequeno, podemos calcular $\chi(T) \equiv \chi(T_N)$ com um erro da ordem de $\overline{\beta}/\Lambda$; por isso dizemos que o erro é controlável. T_N é uma seqüência de temperaturas obtida da condição $\overline{\beta}_N = \overline{\beta}$, ou seja,

$$T_N = \frac{(1+\Lambda^{-1})D\Lambda^{-(N-1)/2}}{2K_B\overline{\beta}} , \tag{6.3}$$

de forma que o índice N define, para cada escolha de $\overline{\beta}$, uma escala logarítmica de temperatura. Valores grandes de N correspondem a temperaturas que são pequenas comparadas com a largura da banda. Para ter detalhes dessa discussão, ver referências [4] [5].

No capítulo anterior obtivemos as autovalores de H_N denotadas por $E_N(j,s,\omega)$ e os autoestados denotados por $|j,s,\omega\rangle_N$. Usando esses resultados e a definição da suscetibilidade magnética dada pela Eq. 4.8 encontramos:

$$\begin{aligned} \frac{K_B T_N \chi_{imp}(T_N)}{(g\mu_B)^2} &= \frac{\sum_{j,s,\omega} \frac{(2j+1)(2s+1)[(2s+1)^2-1]}{12} exp[-\overline{\beta}E_N(j,s,\omega)]}{\sum_{j,s,\omega}(2j+1)(2s+1)exp[-\overline{\beta}E_N(j,s,\omega)]} \\ &- \sum_{l}^{(N+1)/2} \frac{exp(-\overline{\beta}\eta_l)}{[1+exp(-\overline{\beta}\eta_l)]^2} , \end{aligned} \tag{6.4}$$

onde os fatores multiplicando as exponenciais do numerador e do denominador do primeiro termo são as degenerescências de carga axial e de spin.

Na Figura (6.1) mostramos resultados para a suscetibilidade para duas escolhas dos parâmetros U e Γ. A mesma análise de pontos fixos que fizemos para o Modelo de Nível Ressonante faremos agora para o Modelo de Anderson usando o gráfico da suscetibilidade.

Na curva indicada por (o), onde $U \gg \Gamma$, observamos três patamares separados por duas regiões de *crossover*. Como vimos, isso significa que temos duas escalas de energia relevantes

que são a hibridização e a repulsão Coulombiana que quebram a invariância por mudança de escalas da banda de condução. Além disso, esses três patamares correspondem a três pontos fixos dos quais H_N se aproxima. Na região de temperaturas altas, $T > U \gg \Gamma$, U e Γ podem ser desprezados. Temos, assim, um regime de impureza livre. Nesse caso, H_N se aproxima de H_N^{BC} mais o orbital da impureza que pode estar em uma das quatro configurações possíveis todas com energia zero. Então, $\frac{K_B T \chi_{imp}}{(g\mu_B)^2} = \langle S_z^2 \rangle = \frac{1}{8}$. Este valor pode ser observado na Figura (6.1) e nas Figuras (4.2) e (4.4) do Nível Ressonante. Esse ponto fixo foi denominado ponto fixo de orbital livre, H_{OL}^*, e é caracterizado por $U = 0$ e $\Gamma = 0$.

Diminuindo a temperatura até que $T \ll U$, as configurações vazias e duplamente ocupadas tornam-se inacessíveis e nos aproximamos de outro ponto fixo, onde podemos considerar $\Gamma = 0$ e $U = \infty$. Nesta região, a impureza está desacoplada da banda tendo duas configuracões possíveis: ocupada com um elétron com spin para cima ou com um elétron com spin para baixo. A troca de uma configuração para outra é feita através de excitações virtuais para os estados vazios e duplamente ocupados. Neste caso, temos $\frac{K_B T \chi_{imp}}{(g\mu_B)^2} = \frac{1}{4}$. O ponto fixo do qual H_N se aproxima é o ponto fixo de momento local, H_{ML}^*, que é o H_N^{BC} mais um estado de spin $\frac{1}{2}$ livre.

Para temperaturas menores que aproximadamente $\frac{U}{10}$, a suscetibilidade é a mesma que a obtida pelo Modelo de Kondo. A constante de acoplamento antiferromagnético do Hamiltoniano de Kondo, ρJ, [4], está relacionada com os parâmetros U e Γ do Modelo de Anderson simétrico (desde que $U \gg \Gamma$) por [5]:

$$\rho|J| = \frac{8\Gamma}{\pi U}$$

A curva cheia da Figura (6.1) é a curva universal de Kondo. A temperatura de Kondo para $\rho J \ll 1$ (ou $U \gg \Gamma$) é dada por [4] [5]:

$$T_K(J) \cong 0.182 U |\rho J|^{1/2} exp(\frac{-1}{|\rho J|}) \ , \tag{6.5}$$

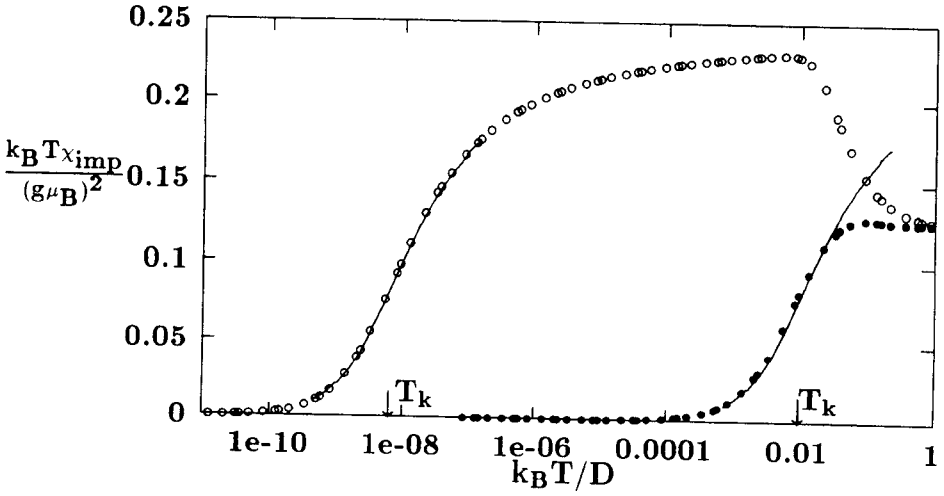

Figura 6.1: Gráficos da suscetibilidade magnética obtidos para o Modelo de Anderson simétrico usando GRN e o procedimento *intercalado* com $\Lambda = 4$, $z_1 = 0.25$, $z_2 = 0.75$. Os parâmetros são $U = 0.1D$ e $V = 0.03D$ para (o) e $U = 0.1D$ e $V = 0.1D$ para (•). As linhas cheias são as curvas universais da suscetibilidade magnética de Kondo para esses parâmetros. As setas indicam as temperaturas de Kondo de cada conjunto de parâmetros.

e está indicada pelas setas na Figura (6.1). Outra forma de determinar T_K é pelo critério [5] $\frac{K_B T \chi_{imp}(T_K)}{(g\mu_B)^2} = 0.071$.

Para $T \ll T_K$, o sistema é desviado para o ponto fixo de acoplamento forte onde $U = 0$ e $\Gamma \to \infty$. Nesse regime, a impureza se acopla fortemente à banda de condução e perde seu caráter magnético, dando $\frac{K_B T \chi_{imp}}{(g\mu_B)^2} = 0$. Então, H_N se aproxima de H^*_{FA}, o ponto fixo de orbital fortemente acoplado como no Modelo de Nível Ressonante.

No gráfico construído com (•), $U \sim \Gamma$. Observamos que as posições do *crossover* dependem da razão U/Γ. Uma diminuição da razão U/Γ leva a um aumento em T_K. O regime de orbital livre permanece o mesmo, mas a região de momento local diminui e a de acoplamento forte aumenta. Se $U \sim \Gamma$, as duas últimas se fundem e o sistema é desviado do ponto fixo de

impureza livre direto para o fortemente acoplado.

Os pontos fixos de orbital livre e de momento local são ditos instáveis e o de orbital fortemente acoplado estável [5]. A Figura (6.2) é um diagrama de fluxo do Modelo de Anderson simétrico, onde os pontos (•) indicam os três pontos fixos descritos acima [5].

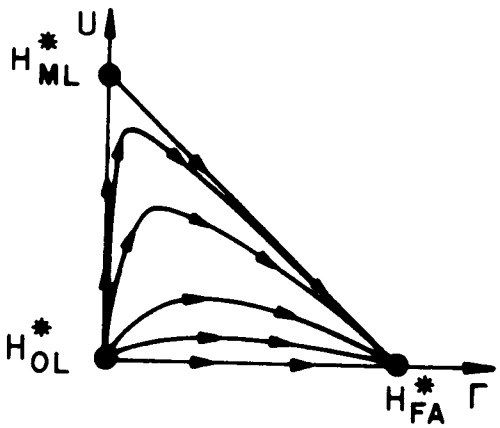

Figura 6.2: Diagrama de fluxo do Modelo de Anderson simétrico, onde os símbolos (•) indicam os pontos fixos do modelo. Uma particular linha indica a evolução de um determinado autovalor de H_N. O ponto fixo H^*_{OL} é instável já que todas as linhas saem dele. Já H^*_{FA} é estável, pois todas as linhas chegam nele. H^*_{ML} poderá ser estável somente se $\Gamma = 0$; do contrário, será instável.

6.2 Calor Específico

Como o Hamiltoniano de Anderson é não quadrático, a expressão 4.14 para o calor específico não se aplica. Devemos partir agora da seguinte definição geral derivada da Eq. 4.13:

$$\frac{C_{imp}(T_N)}{K_B} = \beta^2(\langle E_N^2\rangle - \langle E_N\rangle^2 - \langle\eta^2\rangle + \langle\eta\rangle^2)\,, \tag{6.6}$$

onde as médias $\langle\,\rangle$ são definidas por:

$$\langle \mathcal{O} \rangle = \frac{\sum_n \mathcal{O} exp(-\beta E_n)}{Z} \tag{6.7}$$

onde Z é a função de partição.

Para o espectro de energias de muitos corpos obtido pela diagonalização iterativa de H_N^A, temos:

$$\langle E_N \rangle = \frac{\sum_{j,s,\omega} (2j+1)(2s+1) E_N(j,s,\omega) exp[-\overline{\beta} E_N(j,s,\omega)]}{\sum_{j,s,\omega} (2j+1)(2s+1) exp[-\overline{\beta} E_N(j,s,\omega)]} \tag{6.8}$$

onde os fatores $(2j+1)$ e $(2s+1)$ são as degenerescência de carga axial e de spin, respectivamente:

η é o espectro de banda livre subtraído para se definir a contribuição da impureza ao calor específico.

$$\langle \eta \rangle = \sum_l \frac{\eta_l exp(-\overline{\beta}\eta_l)}{[1 + exp(-\overline{\beta}\eta_l)]^2} \tag{6.9}$$

A entropia é calculada através da integral do calor específico na escala logarítmica das temperaturas:

$$S_{imp}(T) = \int_0^T C_{imp}(T) d(ln(T)) \,. \tag{6.10}$$

A Figura (6.3) mostra o resultado principal dessa dissertação: o calor específico de uma impureza magnética num metal usando o método do GRN para o Modelo de Anderson simétrico, em função da temperatura. A Figura (6.3) também apresenta a exponencial da entropia da impureza, S_{imp}, que mede o número de graus de liberdade efetivos da impureza.

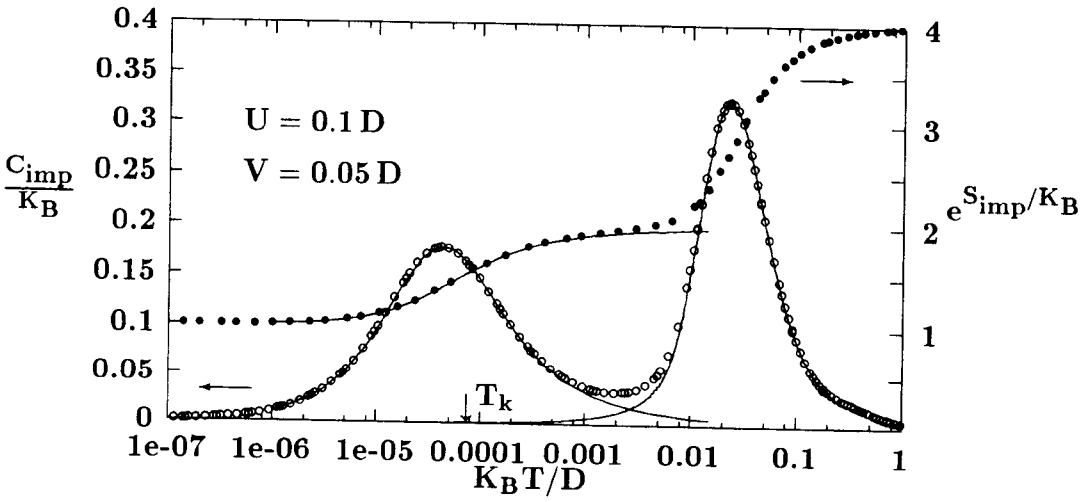

Figura 6.3: Calor específico C_{imp}, indicado por (o), e exponencial da entropia S_{imp}, indicada por (•), para o Modelo de Anderson simétrico obtidos, neste trabalho, por GRN e pelo procedimento *intercalado*. A linha cheia na ressonância de Kondo e na entropia são as curvas exatas obtidas pelo *ansatz* de Bethe com $K_BT_K = 6.2 \cdot 10^{-5}D$. A linha cheia no pico de Schottky é obtida pelo Modelo de Nível Ressonante escolhendo $\varepsilon_d = U/2$ e $V = 0.067D$ para se obter o mellhor ajuste. Os parâmetros usados foram $\Lambda = 4$, $z_1 = 0.25$ e $z_2 = 0.75$.

Esse gráfico é obtido para o caso em que $U > \Gamma$, para se realçar a separação entre os picos. O primeiro pico, chamado ressonância de Kondo, ocorre em energias da ordem de K_BT_K e o segundo, que é um pico da forma de Schottky, ocorre para temperaturas da ordem de $U/2$.

Assim como para a suscetibilidade, podemos estudar o gráfico do calor específico em regiões distintas. Começando pela região de impureza livre onde $T \gg U \gg \Gamma$, temos $C_{imp}/K_B = 0$ e $exp(S_{imp}/K_B) = 4$, pois a impureza pode se encontrar em quatro estados diferentes mas todos com a mesma energia.

Na região de *crossover* entre H^*_{OL} e H^*_{ML}, as configurações vazias e duplamente ocupadas se diferenciam das singelamente ocupadas por uma energia efetiva, ε^*_d, que deve depender de U e Γ. Se Γ fosse zero, teríamos um problema de dois níveis separados pela energia $|\varepsilon_d| = \frac{U}{2}$

com o pico de Schottky ocorrendo em $\Delta = 0.416778\varepsilon_d$. Mais adiante, faremos um estudo da posição do pico Δ^*, o que equivale a estudar a separação efetiva, ε_d^*.

Diminuindo mais a temperatura, vamos para o regime de momento local onde C_{imp}/K_B volta a ser zero e $exp(S_{imp}/K_B) = 2$, pois a impureza pode ocupar apenas os estados degenerados de spin para cima e spin para baixo.

Quando a temperatura se aproxima de T_K, aparece o pico que é devido ao Efeito Kondo.

Para $T \ll T_K$, $exp(S_{imp}/K_B) = 1$ que é o singleto de Kondo no qual a impureza fica congelada e $C_{imp}/K_B = 0$.

Quando $\Gamma \rightarrow U$, a temperatura de Kondo aumenta e o pico de Kondo se aproxima do pico de Schottky. Se $\Gamma \sim U$, os dois se fundem.

A seguir, testamos propriedades que o calor específico deve apresentar, comparamos com resultados analíticos obtidos pelo *ansatz* de Bethe e apresentamos um estudo do pico de Schottky que não foi encontrado na literatura.

6.2.1 Ressonância de Kondo

O Efeito Kondo se manifesta no calor específico como um pico próximo da temperatura de Kondo que é conhecido como ressonância de Kondo. Embora nesses valores de temperatura a impureza possua um único estado, que é degenerado duas vezes, a hibridização V com a banda de condução introduz uma incerteza Γ na energia.

O primeiro cálculo de GRN a exibir o pico de Kondo se deve a Oliveira e Wilkins [18] que usaram um Hamiltoniano equivalente ao de Kondo. Segundo essa referência, o pico ocorre em $0.67T_K$, onde T_K é dada pela Eq. (6.5).

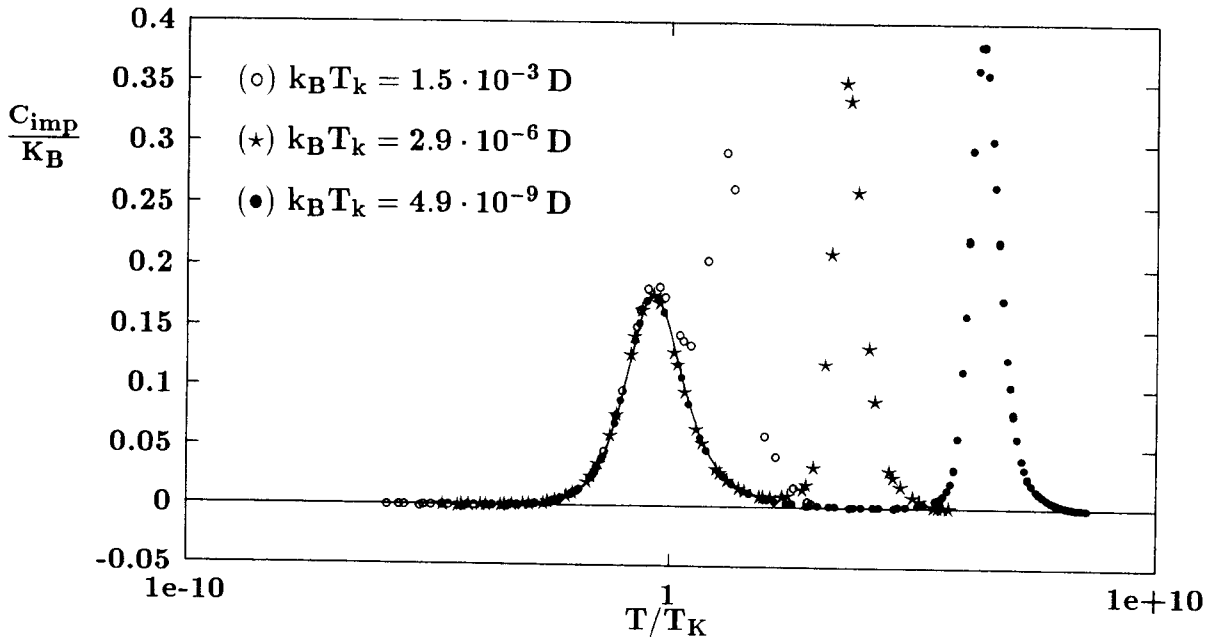

Figura 6.4: Gráficos do calor específico em função de $\frac{T}{T_K}$ obtidos por GRN e procedimento *intercalado*. São mostradas a concordância com a curva analítica de *ansatz* de Bethe e a universalidade da mesma para diferentes valores de T_K. Esta figura também mostra claramente a não universalidade dos picos de Schottky.

A Figura (6.4) compara os nossos resultados para a ressonância de Kondo com a curva obtida por *ansatz* de Bethe para o Modelo de Kondo [7] para diversos valores de T_K, mostrando, a universalidade com T/T_K da ressonância de Kondo (pico à esquerda) e a não universalidade do pico de Schottky (pico à direita). Observe a grande disparidade de valores de T_K e a excelente concordância com a curva analítica.

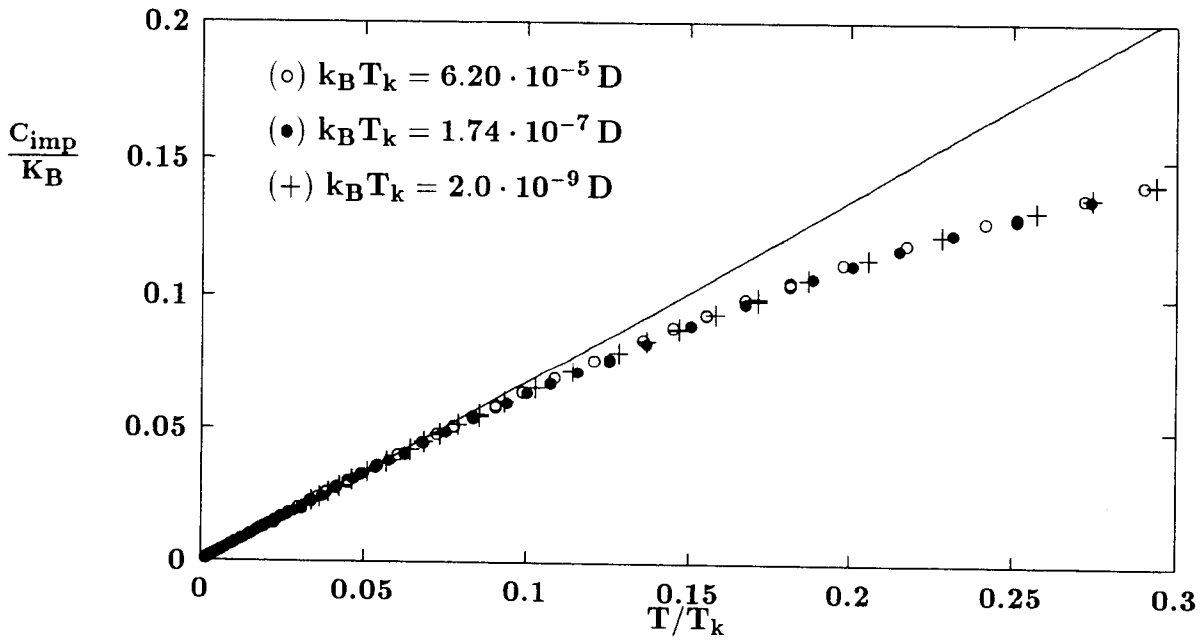

Figura 6.5: Comportamento linear do calor específico a temperaturas baixas em função de T/T_K. A linha cheia é o resultado exato obtido por *ansatz* de Bethe: $C_{imp}/K_B = 0.6777 \cdot T/T_K$, enquanto os pontos (o, • e +) representam os nossos resultados para $\Lambda = 4$, $z_1 = 0.25$ e $z_2 = 0.75$. Os valores de T_K diferem por quatro ordens de grandeza.

6.2.2 Linearidade do Calor Específico a Temperaturas Baixas

Para $T \ll T_K$, o orbital da impureza está fortemente acoplado ao orbital $f_{0\mu}$ da banda de condução formando um singleto. Dessa forma, a menos de uma defasagem de $\pi/2$ nos seus estados, temos a banda livre. Portanto, o comportamento esperado é o de um gás de elétrons livres que tem calor específico linear em T. Isto é o que chamamos de comportamento de líquido de Fermi. Na Figura (6.5) podemos observar esse comportamento e, também, a universalidade do calor específico com T/T_K. A linha cheia é a curva obtida pelo *ansatz* de Bethe [7],

$$C_{imp} = \frac{2\pi^2}{3} 0.103 \frac{T}{T_K} , \tag{6.11}$$

colocada aqui para efeito de comparação.

Deve ser observada a suavidade do conjunto de pontos produzido pelo método *intercalado*. Tal suavidade seria possível sem o uso do procedimento *intercalado* somente com $\Lambda \langle 2$.

6.2.3 Pico de Schottky

Não encontramos na literatura nenhum estudo sobre esse pico. Talvez não tenha despertado interesse porque ocorre em temperaturas muito altas ou talvez porque não existia método que desse bons resultados para o calor específico do Modelo de Anderson. De qualquer forma, nesta seção apresentaremos um estudo, ainda incompleto, desse pico.

O pico de Schottky foi ajustado usando-se o Modelo de Nível Ressonante com $|\varepsilon_d| = \frac{U}{2}$ e variando-se V até obtermos o melhor ajuste, denotado V^*. Como o pico de Schottky se deve apenas à excitação de carga do sistema, isto é, ele advém da transição eletrônica dos níveis singelamente ocupados para os duplamente ocupados ou vazios, devemos considerar o modelo de Nível Ressonante sem spin. Para $V \to 0$, observamos que a razão $\frac{V^*}{V} \to 2$, para qualquer U. Mas quando V é tal que o pico de Schottky se aproxima de T_K, ou em outras palavras, o pico de Schottky e o de Kondo se superpõe, não encontramos como precisar V^*. Para tal, deveríamos subtrair a curva universal de Kondo. Essa é uma da sugestão para trabalhos futuros.

Os estudos que fizemos da posição do pico, Δ^*, são mostradas na Figura (6.6), onde $\Delta = 0.416778\varepsilon_d$, como já dissemos, é a posição do pico quando $\Gamma = 0$. Há dois limites onde propomos formas analíticas para a razão $\frac{\Delta^*}{\Delta}$ em função de $\frac{\Gamma}{U}$.

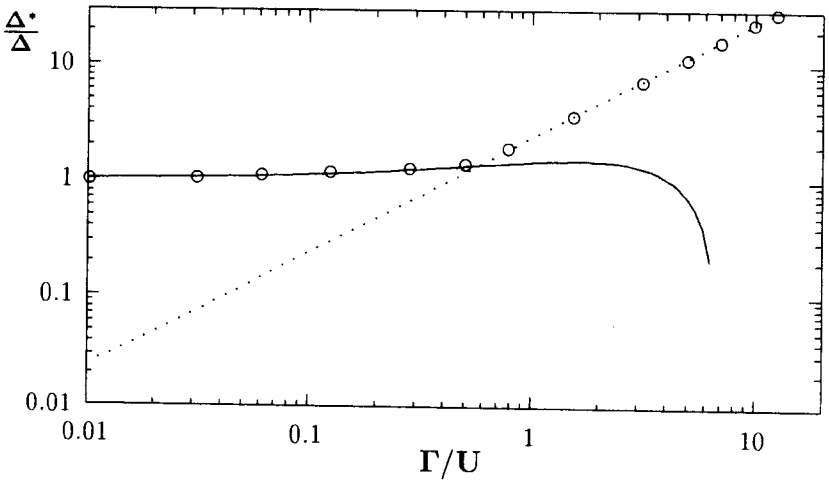

Figura 6.6: Posição do Pico de Schottky do Modelo de Anderson de uma impureza simétrico obtido por GRN (o) para $U = 0.01D$. A curva indicada pela linha cheia é dada pela Equação (6.10) e a indicada pela linha pontilhada é dada pela Equação (6.11).

Quando $U \gg \Gamma$, a razão $\frac{\Delta^*}{\Delta}$ é muito aproximadamente ajustada à curva:

$$\frac{\Delta^*}{\Delta} = 1 + \frac{\Gamma}{\pi U} log(\frac{\pi e U}{2\Gamma}) \,. \tag{6.12}$$

Essa razão tende a um pois quanto menor o Γ, mais nos aproximamos do limite $\Gamma = 0$ que citamos anteriormente, onde o pico ocorre em Δ.

A expressão acima aparece na referência [8] que estuda o Modelo de Anderson por *ansatz* de Bethe. Contudo, ela não aparece exatamente no contexto aqui utilizado, mas na renormalização da energia ε_d do nível da impureza. Como o deslocamento do pico do calor específico se deve a uma renormalização da separação dos níveis da impureza, não é surpresa que a expressão acima reproduza bem os resultados nesse regime.

Para $U \ll \Gamma$, a separação entre os níveis pode ser desprezada e a situação lembra aquela do Nível Ressonante e, portanto, da Figura (4.6) do capítulo 4, o pico está aproximadamente

em $\frac{\Gamma}{2}$. Logo,

$$\frac{\Delta^*}{\Delta} \cong \frac{\Gamma}{0.416778U} \cdot \tag{6.13}$$

Entre os dois regimes, $\frac{\Delta^*}{\Delta}$ não é uma função universal de Γ/U, e não temos uma expressão analítica.

1730 — SERVIÇO DE BIBLIOTECA E INFORMAÇÃO

Capítulo 7

Conclusão

Mostramos que o procedimento *intercalado* aumenta a potencialidade do método de Grupo de Renormalização Numérico para o cálculo de propriedades termodinâmicas.

O problema tratado nesta dissertação é o de impurezas magnéticas em metais através do Modelo de Anderson de uma impureza, cuja solução por métodos perturbativos apresenta divergências logarítmicas numa certa temperatura característica que varia de material para material.

Para diagonalizar o Hamiltoniano de Anderson, que é um Hamiltoniano de muitos corpos e obter propriedades termodinâmicas para qualquer temperatura, usamos o método de GRN desenvolvido por Wilson. O GRN está fundamentado numa discretização logarítmica da banda de condução do metal hospedeiro através de um parâmetro Λ que é a razão entre dois níveis de energia sucessivos da escala discreta que substitui o contínuo da banda e viabiliza o tratamento numérico. Porém, o método é restrito a valores de $\Lambda \sim 3$ o que torna o tratamento de modelos de duas impurezas inviável computacionalmente e não permite o cálculo de propriedades termodinâmicas como o calor específico que apresenta oscilações quando $T \to 0$, ao invés de se anular.

Neste trabalho, aplicamos ao cálculo do calor específico o procedimento *intercalado*, recentemente desenvolvido para o cálculo da suscetibilidade magnética de modelos de duas impurezas. Mostramos, também, que para $\Lambda > 4$ são necessários quatro valores de z para

suavizar as curvas de calor específico.

Através deste método, calculamos, pela primeira vez, o calor específico da impureza do Modelo de Anderson usando o GRN. Obtivemos a ressonância de Kondo que ocorre próximo a T_K e um pico de Schottky que não é universal. Os resultados obtidos estão em excelente concordância com os cálculos exatos para quaisquer valores dos parâmetros envolvidos.

Outro ponto desta dissertação é o emprego do operador carga axial recentemente definido no contexto do Modelo de Kondo de duas impurezas. O GRN inclue uma diagonalização iterativa, onde o tamanho das matrizes aumenta com $2^{2(2N+2)}$, onde N chega a ser da ordem de trinta. Como tratamos do Modelo de Anderson simétrico, usamos o operador carga axial para tirar proveito da simetria partícula-buraco, que caracteriza este modelo. Vimos que o uso da conservação da carga axial pelo Hamiltoniano de Anderson simétrico reduz substancialmente o tamanho das matrizes e facilita o trabalho. Até o momento, ainda não havia aparecido meios para se aproveitar essa simetria do modelo.

Uma continuação desse trabalho é um aprofundamento maior do estudo do pico de Schottky tanto em relação à posição e à largura quanto à comparação com o Modelo de Nível Ressonante. O estudo destes pontos deve levar a uma maior compreensão da influência do metal sobre a impureza e vice-versa.

A aplicação do procedimento *intercalado* ao cálculo do calor específico de modelos de duas impurezas ou de uma impureza com spin maior que $\frac{1}{2}$ são extensões naturais desta dissertação.

Apêndice A

Teorema de Wigner-Eckart

Um operador tensorial irredutível de ordem k é definido como um conjunto de $(2k+1)$ operadores T_k^q, onde q distingue as componentes do tensor: $q = -k, ..., k$. Estas componentes satisfazem as equações abaixo, definidas, por exemplo, nas referências [19] [20]:

$$\begin{aligned} [\mathcal{J}^{\pm}, T_k^q] &= A(k, \pm q) T_k^{q\pm 1} \\ [\mathcal{J}^z, T_k^q] &= q T_k^q \,, \end{aligned} \tag{A.1}$$

onde $\mathcal{J}_{\pm} = \mathcal{J}_x \pm i\mathcal{J}_y$ e $\mathcal{J}_x$, $\mathcal{J}_y$ e $\mathcal{J}_z$ são as componentes do operador de spin definido na Eq. (5.3) ou do operador carga axial definido na Eq. (5.4)

Precisamos mostrar que os operadores $f_{N\mu}^{\dagger}$ e $(-1)^N(-2\mu)f_{N\mu}$ fazem o papel de $T_{k=\frac{1}{2}}^q$ da Eq. (A.1), tanto para a carga axial quanto para o spin. Por exemplo, de

$$[J^+, (-1)^N(-2\mu)f_{N\mu}] = 1 f_{N(-\mu)}^{\dagger} \tag{A.2}$$

$$[S^-, f_{N\mu}^{\dagger}] = \begin{cases} 0 & , \text{ se } \mu = -1/2 \\ 1 f_{N(-\mu)}^{\dagger} & , \text{ se } \mu = 1/2 \end{cases} \tag{A.3}$$

$$[J^z, f_{N\mu}^{\dagger}] = \frac{1}{2} f_{N\mu}^{\dagger} \tag{A.4}$$

$$[J^z, (-1)^N(-2\mu)f_{N\mu}] = -\frac{1}{2}(-1)^N(-2\mu)f_{N-\mu}$$

(A.5)

$$[S^z, (-1)^N(-2\mu)f_{N\mu}] = (-\mu)(-1)^N(-2\mu)f_{N\mu}$$

(A.6)

$$[S^z, f^\dagger_{N\mu}] = \mu f^\dagger_{N\mu} \tag{A.7}$$

concluímos, dadas as relações (A.1), que $A(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}) = 1$ e $A(\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}) = 0$ e que $q = \mu$ para o spin. Para a carga axial, $q = \frac{1}{2}$ para a componente que inclui o operador criação e $q = -\frac{1}{2}$ para a componente que inclui o operador destruição.

Então, $f^\dagger_{N\mu}$ e $(-1)^N(-2\mu)f_{N\mu}$ são componentes de um tensor T^q_k de ordem $k = \frac{1}{2}$ irredutível. Portanto, podemos usar o Teorema de Wigner-Eckart para separar a dependência em s_z e j_z dos elementos de matriz dos estados definidos por $|jj_zss_z\rangle$. Pelo Teorema de Wigner-Eckart, a dependência nas componentes z pode ser extraída explicitamente em termos de coeficientes de Clebsch-Gordan, da seguinte forma:

$$\begin{aligned}
&\langle\ j'j'_zs's'_z|f^\dagger_{N\mu}|jj_zss_z\rangle = \\
&\langle\ jj_z; k = \frac{1}{2}, q = \frac{1}{2}|j'j'_z\rangle\langle ss_z; k = \frac{1}{2}, q = \mu|s's'_z\rangle\langle j's'||T^q_k||js\rangle
\end{aligned}$$

(A.8)

$$\begin{aligned}
&\langle\ j'j'_zs's'_z|(-1)^N(-2\mu)f_{N\mu}|jj_zss_z\rangle = (-1)^N(-2\mu) \\
&\langle\ jj_z; k = \frac{1}{2}, q = -\frac{1}{2}|j'j'_z\rangle\langle ss_z; k = \frac{1}{2}, q = \mu|s's'_z\rangle\langle j's'||T^q_k||js\rangle
\end{aligned}$$

(A.9)

O Teorema de Wigner-Eckart é uma ferramenta importante pois separa as propriedades puramente geométricas do elemento de matriz das propriedades físicas que estão contidas no elemento de matriz invariante. O teorema tem grande valor prático já que os coeficientes de

Clebsch-Gordan são tabelados.

Referências

[1] Kondo, J. *Resistance Minimum in Dilute Magnetic Alloys.* Prog. of Theor. Phys. v. **32**, p. 37, 1964.

[2] Anderson P. W. *Localized Magnetic States in Metals.* Phys. Rev. v. **124**, p. 41, 1961.

[3] Schrieffer J. R.; Wolff P. A. *Relation between the Anderson and Kondo Hamiltonians.* Phys. Rev. v. **149**, p. 491, 1966.

[4] Wilson K. G. *The Renormalization Group: Critical Phenomena and the Kondo Problem.* Rev. Mod. Phys. v. **47**, p. 773, 1975.

[5] Krishna-murthy H. R.; Wilkins J. W.; Wilson K. G. *Renormalization-Group Approach to the Anderson Model of Dilute Magnetic Alloys I. Static Properties for the Simetric Case.* Phys. Rev. B v. **21**, n.3, p. 1003, 1980.

[6] Schotte K. D.;Schotte U. *Interpretation of Kondo Experiments in a Magnetic Field.* Phys. Lett. v. **55A**, n.1, p. 38, 1975.

[7] Desgranges H. U.; Schotte K. D. *Specific Heat of the Kondo Model.* Phys. Lett. v. **91A**, n.5, p. 240, 1982.

[8] Tsvelick A. M.; Wiegmana P. B. *Exact Results in the Theory of Magnetic Alloys.* Adv. Phys. v. **32**, n.4, p. 453, 1983.

[9] Hirsh J.; Fye R. *Monte Carlo Method for Magnetic Impurities in Metals.* Phys. Rev. B v. **56**, n.23, p. 2521, 1986.

[10] Bickers N. E. *Review of Techniques in the Large N expansion for Dillute Magnetic Alloys.* Rev. Mod. Phys. v. **59**, n.4, p. 845, 1987.

[11] Yoshida M.; Whitaker M. A.; Oliveira L. N. *Renormalization-Group Calculation of Excitation Properties for Impurity Models.* Phys. Rev. B v. **41**, n.13, p. 9403, 1990.

[12] Oliveira W. C.; Oliveira L. N. *Generalized Numerical Renormalization Group Method to Calculate the Thermodinamical Properties of Impurities in Metals.* Phys. Rev. B v. **49**, n.17, p. 11 986, 1993.

[13] Silva J. B. *Novo Método de Grupo de Renormalização Numérico Aplicado ao Cálculo da Suscetibilidade Magnética no Modelo de Anderson de Duas Impurezas.* Tese de Doutoramento (IFQSC-1994)

[14] Wilson K. G. *Renormalization Group Methods.* Adv. Math. v. **16**, p. 170, 1975.

[15] Frota H. O. *Fotoemissão no Modelo de Anderson para Compostos de Terras-Raras com Valência Flutuante.* Tese de Doutorado (IFQSC-1985)

[16] Mahan G. D. Many-Particle Physics., *Plenum Press, New York and London* , 1991.

[17] Jones B. A. *Low-Temperature properties of the Two-Impurity Kondo Hamiltonian.* Phys. Rev. Lett. v.**61**, n.1, p.125, 1988.

[18] Oliveira L. N.; Wilkins J. W. *Specifc Heat of the Kondo Model.* Phys. Rev. Lett. v. **47**, n.21, p. 1553, 1981.

[19] Fetter A. L., Walecka J. D. Quantum Theory of Many-Particle Systems., *Plenum Press, New York and London* , 1991.

[20] Merzbacher E. Quantum Mechanics, *John Wiley e Sons, New York,* 1961.