

**TESE DE MESTRADO**

DIAGRAMA DE FASE DO MODELO COLAR DE  
KONDO A BAIXAS TEMPERATURAS

Daniel Lorenzo Reyes López

Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas  
Rio de Janeiro, Novembro 2004

Tese de Mestrado submetida ao Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas  
sob orientação do Pesquisador **Dr. Múcio Amado Continentino**  
e co-orientação do Pesquisador **Dr. Amós Troper**  
para a obtenção do título de Mestre em Física por  
**Daniel Reyes López.**

2004

*A meus pais, Lorenzo & Teófila.*

# Agradecimentos

Agradeço ao meu pai, minha mãe e meus irmãos pelo carinho e pelo apoio em minha educação.

A meu orientador, professor Múcio Continentino, não só pela orientação, mas também por ter-me brindado sua amizade sincera.

À professora Elisa Baggio-Saitovitch, por ter-me brindado sua ajuda sempre que precisei.

Ao professor Amós Troper pela sua orientação inicial em minha formação de físico teórico.

A meus amigos Rosângela, André e Julio pelas sugestões ao lerem a tese.

A meus amigos Miguel, Willian, Victor, Virginia, Jose Luis e Vicente pelos gratos momentos vividos.

Aos funcionários da biblioteca do CBPF.

A CAPES pelo apoio financeiro.

Agradeço finalmente a todas pessoas que faltaram aqui que também achem que mereçam algum agradecimento.

# Resumo

Uma versão simplificada do modelo da rede de Kondo (simetria de spin  $SU(2)$ ), o modelo colar de Kondo (simetria  $U(1)$ ), é estudada a temperatura finita usando uma representação para os spins dos momentos localizados e dos elétrons de condução em termos de operadores singleto e tripleto Kondo locais.

Calculamos a função de Green de duplo tempo para encontrar a relação de dispersão das excitações do sistema. Mostramos que em 3-d existe um estado ordenado antiferromagnético à temperatura finita mas em 2-d a ordem magnética de longo alcance só acontece a  $T = 0$ .

Finalmente estudamos o comportamento da linha crítica de Neel como função da dimensão e mostramos que para  $d = 3$  o expoente de deslocamento perto do ponto crítico quântico assume o valor de  $\psi = 1/2$ .

# Abstract

A simplified version of the Kondo lattice model (symmetry of spin  $SU(2)$ ), the Kondo necklace model (symmetry  $U(1)$ ) is studied at finite temperature using a representation for the localized and conduction electron spins in terms of local Kondo singlet and triplet operators.

We calculate the double time Green's functions to get the dispersion relation of the excitations of the system. We show that for  $d=3$  there is an antiferromagnetic ordered state at finite temperatures but in  $d=2$  long range magnetic order occurs only at  $T = 0$ .

Finally, we study the behavior of the critical line of Neel as a function of the dimension and show that for  $d = 3$  the shift exponent close to the quantum critical point assumes the values of  $\psi = 1/2$ .

# Conteúdo

<b>Dedicatória</b>	<b>ii</b>
<b>Agradecimentos</b>	<b>iii</b>
<b>Resumo</b>	<b>iv</b>
<b>Abstract</b>	<b>v</b>
<b>1 Introdução</b>	<b>1</b>
<b>2 Aspectos experimentais dos férmions pesados</b>	<b>4</b>
2.1 Introdução . . . . .	4
2.2 Férmions pesados . . . . .	5
2.3 Férmions pesados com ordem magnética sob pressão . . . . .	8
2.3.1 Ordem Antiferromagnética . . . . .	9
2.3.2 Ordem Ferromagnética . . . . .	11
2.4 Férmions pesados sob campo magnético . . . . .	12
2.5 Férmions pesados e Supercondutividade sob pressão . . . . .	15
<b>3 Modelos para sistemas de férmions pesados</b>	<b>17</b>
3.1 Introdução . . . . .	17
3.2 O efeito Kondo . . . . .	19
3.3 A interação RKKY . . . . .	22

3.4	Competição entre o efeito Kondo e a interação RKKY . . . . .	23
3.5	Modelo da rede de Kondo . . . . .	26
<b>4</b>	<b>Operadores de Sachdev</b>	<b>30</b>
4.1	Introdução . . . . .	30
4.2	Os operadores de enlace . . . . .	30
4.3	Condição de estado físico possível . . . . .	35
4.4	Relações de comutação entre os operadores de enlace . . . . .	35
<b>5</b>	<b>Diagramas de fases do Hamiltoniano colar de Kondo</b>	<b>39</b>
5.1	O Hamiltoniano colar de Kondo . . . . .	40
5.2	Hamiltoniano de modelo colar de Kondo, na representação dos oper- adores de Sachdev . . . . .	45
5.3	Aproximação de Campo Médio . . . . .	47
5.3.1	Fase ordenada Antiferromagnética . . . . .	47
5.4	Hamiltoniano colar de Kondo na aproximação de Campo Médio . . . .	48
5.5	Equações de movimento do sistema . . . . .	50
5.5.1	Cálculo dos valores médios . . . . .	51
5.6	Energia livre do modelo colar de Kondo a temperatura finita . . . . .	53
5.6.1	Energia livre do modelo colar de Kondo no estado fundamental	53
5.7	Diagrama de Fase do modelo colar de Kondo no estado fundamental .	55
5.7.1	Em duas dimensões . . . . .	56
5.7.2	Em três dimensões . . . . .	57
5.8	Parâmetros de ordem singleto e tripleto a temperatura finita . . . . .	59
5.8.1	Aproximação a baixas temperaturas . . . . .	60
5.9	Caráter do ponto crítico quântico . . . . .	61
5.10	Diagramas de Fase do modelo colar de Kondo a baixas temperaturas	62
5.10.1	Em duas dimensões . . . . .	62

5.10.2 Em três dimensões . . . . .	64
5.11 Comportamento da linha crítica de Neel em d-dimensões . . . . .	66
<b>6 Conclusões e Perspectivas</b>	<b>70</b>
<b>A O Método das Funções de Green:</b>	<b>72</b>

# Lista de Figuras

2.1	Diagrama de fase genérico de um férmion pesado. . . . .	6
2.2	Diagrama de fase do composto $CeCu_{6-x}Au_x$ . . . . .	10
2.3	Diagrama de fase do composto $CePt$ sob pressão. . . . .	13
2.4	Diagrama de fase do composto $CeCu_{5.2}Ag_{0.8}$ . . . . .	14
2.5	Diagrama de fase do composto $CePd_2Si_2$ . . . . .	16
3.1	O efeito Kondo. . . . .	20
3.2	Diagrama de fase de Doniach. . . . .	25
3.3	Diagrama de fase de um férmion pesado mostrando a linha de coerência a linha crítica e os diferentes estados líquido de Fermi e não-líquido de Fermi. . . . .	28
5.1	Cadeia colar de Kondo para quatro sítios. . . . .	42
5.2	Diagrama de fase do modelo colar de Kondo em três dimensões, pelo método grupo de renormalização de campo médio. . . . .	43
5.3	Diagrama de fase do modelo colar de Kondo em três dimensões comparado com resultados experimentais para compostos de $Ce$ . . . . .	44
5.4	Gráfico do momento magnético “staggered” e do gap de spin para o KNM em duas dimensões no estado fundamental. . . . .	57
5.5	Gráfico do gap de spin e do momento magnético “staggered” para o KNM em três dimensões no estado fundamental . . . . .	58

5.6	Figura demonstrativa da transição de fase no estado fundamental para o KNM em 2D. . . . .	63
5.7	Diagrama de fase do KNM em três dimensões a temperatura finita. .	67

# Lista de Tabelas

2.1	Propriedades físicas básicas entre o estado líquido de Fermi e NFL. . . . .	8
5.1	Valores da integral $f(d)$ em função da dimensão. . . . .	69
5.2	Valores de $I(d, T)$ em função da dimensão. . . . .	69

# Capítulo 1

## Introdução

Um sólido apresenta ferromagnetismo (FM) quando os momentos magnéticos de seus átomos se ordenam de forma espontânea em uma mesma direção paralela. Entretanto, se o ordenamento é anti-paralelo se obtêm antiferromagnetismo (AF). A interação dipolar clássica entre estes momentos magnéticos é bastante fraca (de ordem  $10^{-5}$ eV) para poder explicar as temperaturas de transições de fase magnéticas obtidas nos laboratórios (da ordem de  $10^2$  a  $10^3$ K). Desde os primeiros tempos da mecânica quântica, sabia-se que os mecanismos de acoplamento que dão origem ao magnetismo e a outros fenômenos, como a supercondutividade e a transição metal-isolante, estão associadas as seguintes propriedades fundamentais dos elétrons: o spin, a energia cinética, o princípio de exclusão de Pauli (estatística fermiônica) e a repulsão Coulombiana entre os elétrons.

Os modelos efetivos de elétrons independentes, também chamados modelos de um corpo, não podem descrever esses fenômenos cooperativos, nos quais as interações eletrônicas são o ingrediente essencial. Os modelos que incorporam completamente as interações Coulombianas entre elétrons levam a problemas de muitos corpos, muito difíceis de serem resolvidos devido ao espaço de Hilbert crescer exponencialmente com o número de elétrons. Neste caso, o esforço teórico está em encontrar

modelos simplificados, onde só estejam incluídos um reduzido número de estados de uma partícula e elementos de matriz devidos à interação. Este enfoque está fundamentado no conceito de grupo de renormalização que permite eliminar os estados de maior energia e obter um Hamiltoniano efetivo que atua dentro do sub-espaço de baixas energias.

Essas características eletrônicas já foram reportadas experimentalmente há algumas décadas em compostos intermetálicos baseados em *Ce*, *Yb* e *U*, e têm sido objeto de extensivos estudos tanto do ponto de vista teórico como experimental [1]. O enorme interesse por estes compostos se deve às suas propriedades físicas não usuais [2], tais como: comportamento “férmions pesados” (HF, do inglês Heavy Fermions), coexistência entre as fases magnéticas (ferromagnéticas ou antiferromagnéticas) e supercondutora, valência intermediária, efeito Kondo, flutuação de spin, transições metamagnéticas, etc. Muitos estudos realizados nestes compostos mostraram que a forte hibridização entre os elétrons  $4f$  ( $5f$ ) e os elétrons da banda de condução afeta, significativamente, suas propriedades físicas, sendo o fator dominante na competição entre a interação intra-sítio (efeito Kondo) e inter-sítio (interação RKKY) e, conseqüentemente, determinando o estado fundamental do sistema [3].

Visando estudar a relação entre o efeito da blindagem Kondo e a interação RKKY, Doniach propôs um modelo para o Hamiltoniano da rede de Kondo unidimensional, o qual chamou de modelo colar de Kondo (KNM, do inglês Kondo necklace model). Neste modelo, os elétrons de condução são substituídos por uma cadeia de spins acoplados  $XY$ , tal que flutuações de carga são desprezadas [3].

Esta dissertação está direcionada ao estudo desse modelo, usando uma nova representação de spins proposta por Sachdev [4], com a finalidade de achar os diagramas de fase tanto no estado fundamental, como a temperatura finita.

A seguir detalhamos a estrutura desta dissertação.

- No capítulo 2, apresentamos uma breve revisão das características experimentais dos férmions pesados. Veremos como a pressão e o campo magnético externo podem servir como parâmetros de controle, para o estudo do ponto crítico quântico. Finalmente, fazemos uma breve revisão da coexistência entre a supercondutividade e a ordem magnética sob pressão.
- No capítulo 3, apresentamos a física das interações desenvolvidas nestes materiais, o efeito Kondo e a interação RKKY, assim como o modelo da rede de Kondo como representação teórica básica dos férmions pesados.
- No capítulo 4, desenvolvemos o formalismo que usamos para representar os operadores de spin, os chamados operadores de enlace (bond-operators) de Sachdev, com a finalidade de compreender a álgebra destes operadores de spin e assim aplicá-los no estudo da rede colar de Kondo.
- No capítulo 5, estudamos as propriedades do sistema colar de Kondo e encontramos diversos diagramas de fase, tanto no estado fundamental, como a temperatura finita em 2 e 3 dimensões. Finalmente, fazemos um estudo numérico do possível comportamento da linha crítica de Neel em função da dimensão espacial.
- No capítulo 6, apresentamos as conclusões e perspectivas gerais da dissertação.

# Capítulo 2

## Aspectos experimentais dos férmions pesados

### 2.1 Introdução

O estudo experimental de sistemas fortemente correlacionados, entre estes, os chamados férmions pesados (HF) têm sido intenso nos últimos anos. Isto principalmente pelo interesse em sistemas próximos a um “ponto crítico quântico” (QCP, do inglês Quantum Critical Point). O atrativo científico que estes sistemas despertam está baseado no entendimento da física dos sistemas fortemente correlacionados.

Neste capítulo apresentamos, brevemente, os resultados experimentais<sup>1</sup> que motivaram nosso estudo teórico de sistemas que apresentam uma transição de fase quântica. Começaremos com uma descrição básica dos chamados férmions pesados para depois mostrar os comportamentos destes materiais, quando apresentam uma ordem magnética. Do ponto de vista experimental, podemos estudar o comportamento das propriedades magnéticas e de transporte como função de variáveis externas ou internas ao sistema como a pressão externa<sup>2</sup>, campo magnético externo

---

<sup>1</sup>Basicamente, nos referimos ao trabalho de Stewart[5].

<sup>2</sup>Muito difícil de ser controlada, fato pelo qual alguns físicos experimentais utilizam o campo magnético externo.

ou substituição química<sup>3</sup>.

Veremos como, as variáveis pressão e campo magnético, podem ser usadas para conduzir os HF para uma transição de fase de segunda ordem passando pelo QCP<sup>4</sup>. Daremos uma breve explicação de ambos métodos e apresentaremos alguns sistemas estudados com estes parâmetros. Finalmente, é considerado um fenômeno que está atualmente captando uma grande atenção de físicos experimentais quanto de teóricos, que é a coexistência de supercondutividade e ordem magnética quando uma pressão externa é aplicada.

## 2.2 Férmions pesados

Os férmions pesados representam o protótipo dos sistemas eletrônicos fortemente correlacionados. Estes sistemas formam uma classe de materiais que se caracterizam por correlações eletrônicas fortes e porque estão próximos de um ponto crítico quântico que determina suas propriedades físicas. Como se apresenta na figura 2.1, este QCP separa, basicamente, o sistema HF de um estado magnético de um não magnético.

Os HF são materiais intermetálicos contendo elementos metálicos e terras raras (TR), tipo *Ce*, *Yb* ou Actinídeos (*Ac*), tipo *U* [6]. Estes apresentam, geralmente, uma configuração do tipo  $4f^n 5d^1 6s^2$  para as TR ( $5f^n 6d^1 7s^2$  no caso dos *Ac*), com a camada *f* incompleta, enquanto que os elétrons das camadas mais externas (*d* e *s*) formam uma banda de condução e, em primeira aproximação, seus elétrons podem ser considerados como não correlacionados.

---

<sup>3</sup>Esta pode ser realizada de duas maneiras: pela substituição do metal não magnético ligado ao *Ce* (*Yb* ou *U*) ou pela diluição magnética, na qual substituem-se os íons de terras raras por íons não magnéticos como *La* e *Y*.

<sup>4</sup>Veremos ao longo desta dissertação que a descoberta deste ponto (ponto crítico quântico) é de suma importância para poder estudar estes materiais.

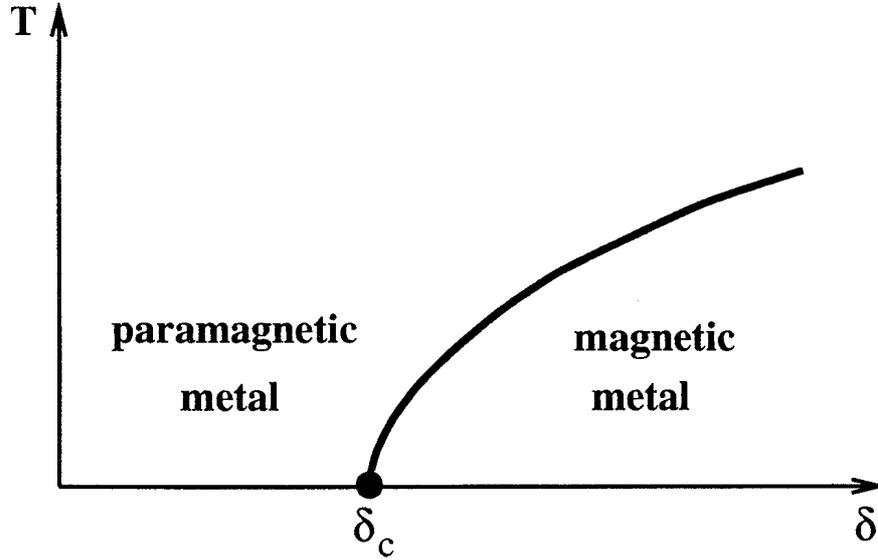


Figura 2.1: Diagrama de fase genérico de um férmion pesado o qual exibe um ponto crítico quântico a temperatura  $T = 0$ , isto num valor crítico de algum parâmetro de controle  $\delta = \delta_0$ . [7]

Por um lado, a instabilidade nas camadas  $f$  dos elementos de TR (ou Ac) proporciona um caráter ambíguo para os elétrons  $f$ , na fronteira entre serem considerados como localizados ou itinerantes. Por outro lado, os elétrons de condução fornecidos pelos elementos metálicos aumentam a interação elétron-elétron nestes materiais e, como conseqüência, um alto valor da massa efetiva ( $m_{eff}$ ) de seus elétrons de condução será observado. A ordem de grandeza da  $m_{eff}$  das quase-partículas (dos HF) se encontra entre  $100-1000m_e$  ( $m_e \sim$  massa do elétron) [6]. O fato de considerar a massa das novas quase-partículas renormalizada à uma escala maior, explica muitas das propriedades anômalas observadas experimentalmente neste materiais, particularmente no estado líquido de Fermi (FL, do inglês “Fermi Liquid”) [8]. Segundo a teoria proposta por Landau, a susceptibilidade magnética  $\chi(T)$  e o calor específico dividido pela temperatura  $C(T)/T$ , tendem a uma constante no limite em que  $T \rightarrow 0$ . Com relação ao transporte elétrico, o comportamento previsto para a

resistividade em função da temperatura é dado por  $\rho(T) = \rho_0 + AT^2$ , onde  $\rho_0$  é uma resistividade residual extrínseca e  $A > 0$ . Convém enfatizar que esta aproximação só é válida abaixo da chamada temperatura de coerência ( $T_{coh}$ ) [8].

De uma forma geral, as propriedades físicas dos férmions pesados são descritas pela competição entre duas interações: a blindagem parcial dos momentos magnéticos pelos elétrons de condução (efeito Kondo) e a interação magnética coletiva de longo alcance entre os momentos localizados (interação Ruderman-Kittel-Kosiy-Yosida - RKKY). Ambas interações escalam duas energias diferentes<sup>5</sup>, cujas temperaturas características,  $T_K$  e  $T_{RKKY}$ , dependem da intensidade do parâmetro de controle ( $J/W$ ), sendo  $J$  a constante de acoplamento entre o spin dos íons  $f$  e o spin dos elétrons de condução, e  $W$  a largura da banda dos elétrons de condução [3]. O estado magnético do HF é definido quando a interação RKKY é maior que a interação Kondo, e o estado não magnético é definido na situação contrária. A questão mais interessante ocorre quando a competição entre ambas interações está balanceada. Neste caso, os HF se apresentam numa situação de instabilidade magnética, próximo a uma transição de fase de segunda ordem, de um estado magnético (M) para um não magnético (NM). O valor do parâmetro de controle que fixa a transição de fase de segunda ordem na temperatura zero  $(J/W)_c$ , é conhecido como ponto crítico quântico (QCP), região onde as flutuações do parâmetro de ordem são determinadas pela mecânica quântica. Muito próximo do QCP é de se esperar um comportamento não líquido de Fermi (NFL, do inglês, “Non-Fermi Liquid”), podendo coexistir, em alguns casos, com um estado supercondutor [9]. Neste regime, aplicam-se algumas modificações com respeito a certas propriedades físicas do sistema. Por exemplo,  $\chi(T)$  e  $C(T)/T$  divergem de forma logarítmica ou como lei de potência quando  $T \rightarrow 0$  e  $\rho(T)$  varia com lei de potência  $T^\beta$ ,  $1 < \beta < 2$  [5]. De todas estas características do estado NFL, a divergência de  $C(T)/T$  quando  $T \rightarrow 0$  é a

---

<sup>5</sup>Nos ocuparemos disto com mais detalhes no próximo capítulo.

mais importante, devido a esta implicar que a densidade de estados na superfície de Fermi diverge, motivo pelo qual dificilmente a física destes materiais possa ser entendida no contexto da teoria de Landau. Este comportamento NFL é observado para determinadas concentrações dos elementos químicos que formam os compostos ou para determinados valores dos parâmetros externos, como pressão ou campo magnético. Finalmente, na região crítica quântica se espera que as interações entre as excitações fundamentais das quasipartículas e as flutuações de spin expliquem o desaparecimento do magnetismo no QCP [5, 10, 11, 12]. Na tabela 2.1 apresentamos as propriedades físicas básicas do estado líquido de Fermi e NFL.

Propiedade Física	Líquido de Fermi	NFL
Susceptibilidade $\chi(T)$	Constante (paramagnetismo)	$\propto \chi_0 - \gamma\sqrt{T}$ , $1 \leq \beta < 2$
Resistividade $\rho(T)$	$\propto T^2$	$\propto T^\beta$ , $1 \leq \beta < 2$
$C(T)/T$	constante	$\propto T^{\frac{d-z}{z}}$

Tabela 2.1: Comparação das propriedades físicas básicas entre o estado líquido de Fermi e NFL,  $d$  é a dimensão e  $z$  o expoente dinâmico. No caso AF é  $z = 1$  e no FR  $z = 2$ .

Desde o ponto de vista experimental, a pressão externa (P) e o campo magnético externo (B) são ferramentas poderosas para investigar o comportamento crítico quântico nos HF. Ambas técnicas experimentais influenciam as correlações eletrônicas entre os íons  $f$ , conseguindo ter um controle sob parâmetro de controle  $J/W$  [5]. Nas próximas seções nos ocuparemos destes casos.

## 2.3 Férmions pesados com ordem magnética sob pressão

A pressão como parâmetro vem sendo usada por físicos experimentais desde

1995 [13, 14], já que induz mudanças no parâmetro de controle  $J/W$ <sup>6</sup>. Além disso, os experimentos com pressão são considerados métodos limpos, pois os defeitos e impurezas introduzidos no material são mínimos comparados ao método de substituição química (substituição de um átomo por outro diferente). Assim, podemos obter um diagrama de fase experimental para os HF, esquematizando o comportamento destes com a variação da temperatura e do parâmetro de controle  $J/W$ , sendo  $J/W - (J/W)_c \propto (P - P_c)$ . Com esta idéia, as propriedades físicas do QCP podem ser exploradas experimentalmente, determinando o QCP na pressão crítica  $P_c$ .

As previsões teóricas para as leis que governam a transição antiferromagnética-ponto crítico quântico AF-QCP não são as mesmas quanto para a transição ferromagnética-ponto crítico quântico FM-QCP [10, 11, 12]. Estudaremos brevemente nas próximas seções, alguns sistemas que apresentam ordem magnética<sup>7</sup> (FM ou AF) quando aplicamos pressão.

### 2.3.1 Ordem Antiferromagnética

As transições AF-QCP têm sido muito reportadas experimentalmente. Daremos uma breve descrição de alguns compostos que apresentam este ordenamento magnético, que são explicados teoricamente por modelos baseados na proximidade de uma transição magnética e que têm uma temperatura de ordenamento próxima do zero absoluto no QCP [11, 15, 16, 17, 18].

- 1.  $CeCu_{6-x}Au_x$ , que se apresenta numa fase antiferromagnética (AF) para  $x > 0.1$ . Para  $x = 0.1$  a temperatura de Néel  $T_N$  anula-se. O comportamento

---

<sup>6</sup>As correlações eletrônicas nos HF são muito sensíveis à separação entre os íons magnéticos  $f$ , e podem ser explorados por efeito da pressão.

<sup>7</sup>O cenário físico na vizinhança do QCP não depende da ordem magnética do estado fundamental ( $P=0$ ).

do sistema passa a ser dominado pelo ponto crítico quântico e a resistividade se comporta como  $\rho(T) \approx \rho_0 + AT$  com  $A > 0$  na região NFL [19]. No  $CeCu_{5.8}Au_{0.2}$  ( $T_N = 0.25K$ ) acima de uma pressão de 9kbar o AF é suprimido. Da mesma forma no  $CeCu_{5.7}Au_{0.3}$  ( $T_N = 0.5K$ ). A figura 2.2 mostra o diagrama de fase  $T$  vs  $x$  deste sistema.

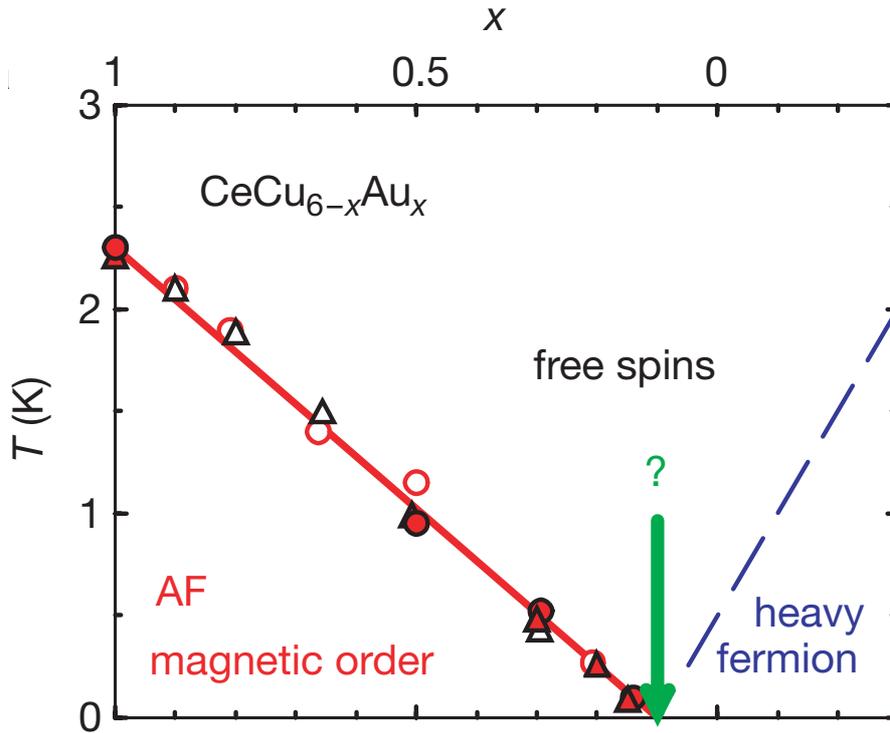


Figura 2.2: Diagrama de fase do composto  $CeCu_{6-x}Au_x$  temperatura versus dopagem, onde incrementando a concentração de  $Au$  leva a um ordenamento AF. O QCP está em  $x = 0.1$ . Figura reproduzida da referência [19].

- 2.  $CePd_2Si_2$ , que se apresenta numa fase AF quando a pressão externa aplicada  $P$  é inferior a 28 kbar. Para  $P = 28$  kbar  $T_N$  se anula e a resistividade se comporta como  $\rho(T) \approx \rho_0 + BT^{1.2}$ ,  $B > 0$  na região NFL [20].
- 3.  $CeIn_3$ , que se apresenta numa fase AF à pressão ambiente para  $T < 10.1K$ . Para  $P = 26$  kbar, a fase AF é destruída e, para  $P = 29$  kbar a resistividade se

comporta como  $\rho(T) \approx \rho_0 + AT^\alpha$  (NFL), onde  $\alpha = 1.6$  a  $T = 3\text{K}$  e  $\alpha = 0.8$  a  $T = 25\text{K}$ . O comportamento passa a ser o característico de um líquido de Fermi (FL) quando a pressão externa é superior a  $P_c = 30\text{kbar}$  [21].

### 2.3.2 Ordem Ferromagnética

Contraditoriamente ao amplo estudo das transições AF-QCP, não tem sido muito reportada a transição FM-QCP, e nunca até a presente data em compostos de *Ce* [5]. Isto se deve, primeiramente, a escassez de compostos HF de *Ce* com estado fundamental FM obtidos nos laboratórios e, por outro lado, aos complicados diagramas de fase que eles apresentam, muitas vezes mudando para uma ordem AF antes de atingir o QCP [22].

Das medidas de resistividade  $R(T)$  dos HF ferromagnéticos podem ser obtidos a temperatura de Curie ( $T_c$ ) e o valor do gap da interação elétron-magnon ( $\Delta$ ), este último podendo ser usado para definir o tipo de ordem magnética no material [23, 24]. Com estas duas grandezas físicas é possível construir um diagrama de fase para os compostos HF. Além disso, se espera que na região crítica quântica, as medidas de  $R(T)$  mostrem uma dependência com a temperatura associada a um estado não líquido de Fermi (NFL) caracterizando o QCP nos diferentes diagramas de fase [3, 5, 8, 9]. Apresentamos abaixo alguns compostos que têm este tipo de ordem magnética.

- 1. *CePd<sub>2</sub>Al<sub>2</sub>Ga*, com  $T_c = 1.8\text{K}$ . Estudos prévios sugerem que este composto muda de ordem magnética de FM para uma diferente, possivelmente AF sob pressão [25]. Mais recentemente, em uma tese de doutorado [26], mostrou-se que (através dos valores de  $\Delta$  dos magnons) a mudança de ordem magnética de FM para AF ocorre em torno de  $0.5\text{GPa}$ . Embora a exploração na região crítica quântica não tenha sido realizada com sucesso, do ponto de vista experimental,

a utilização de um formalismo teórico de onda de spin revela que este composto apresenta um tipo de transição AF-QCP [26].

- 2. *CePt*, que apresenta uma ordem ferromagnética a pressão ambiente com um  $T_c \sim 5.8\text{K}$ . Recentemente Larrea et. al. mostraram, pela primeira vez, através de medidas de susceptibilidade e resistência elétrica AC sob pressão que, este sistema apresenta uma transição FM-QCP [26]. Acima do QCP, o composto *CePt* recupera seu comportamento de líquido de Fermi. Dentro deste contexto, um estudo do comportamento crítico usando o campo magnético externo vem sendo realizado no CBPF por um grupo de pesquisa coordenado pela professora Saitovitch, com o objetivo de entender o cenário físico em presença de campo magnético desta transição pouco usual FM-QCP. Na figura 2.3 é mostrado o diagrama de fase do composto *CePt* quando uma variação em pressão acontece [27].

## 2.4 Férmions pesados sob campo magnético

Como vimos acima, a pressão como parâmetro de controle experimental vem sendo usada já há quase uma década. No entanto, as dificuldades na medida das propriedades termodinâmicas como por exemplo, o calor específico, tem limitado em certos casos o número de sistemas estudados com esse parâmetro. Devido ao grande número de HF que apresentam transição AF a baixas temperaturas, Heuser et. al. [28] no ano de 1998 começaram a publicar uma série de artigos nos quais apresentava-se a possibilidade de atingir o ponto crítico quântico aplicando um campo magnético ( $B$ ) sobre o composto HF. Embora estes sistemas apresentem comportamento NFL em um campo magnético crítico  $B_c$  ( $T_N \rightarrow 0$ ), em 1999 foi reportado [29] um sistema (*CePtSi<sub>0.4</sub>Ge<sub>0.6</sub>*) mostrando comportamento FL quando

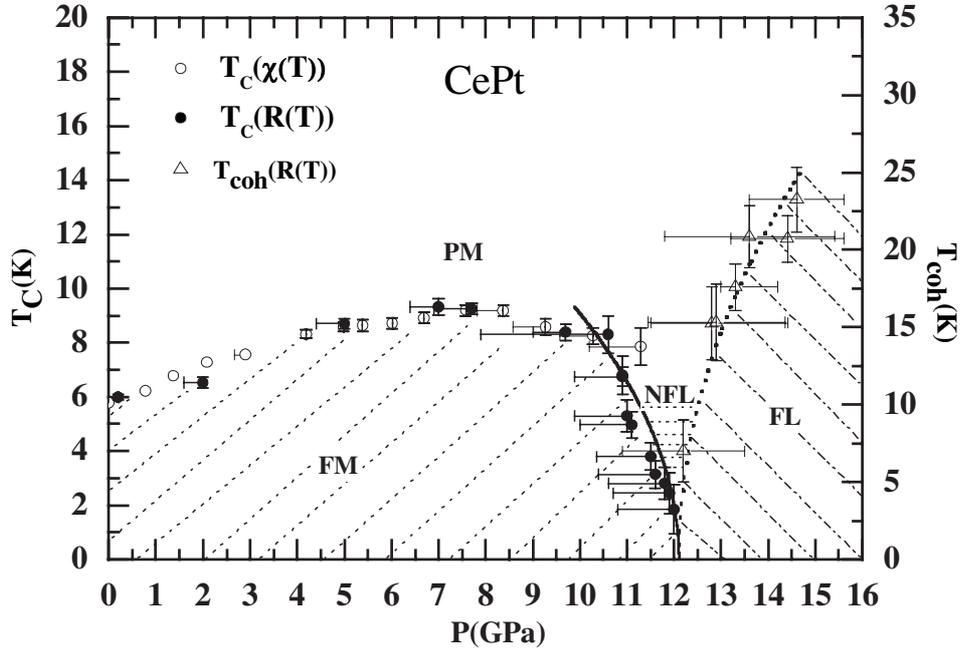


Figura 2.3: Diagrama de fase do composto  $CePt$  sob pressão. O QCP é reportado no valor crítico  $P_c = 12.1$  GPa. Os valores de temperatura de coerência são também incluídos. A linha crítica e a linha de coerência são dominadas pelo termo de campo medio  $|\delta|^{1/2}$  onde  $|\delta|$  mede a distância ao QCP, quer dizer,  $|\delta| = P - P_c$  [27].

aplicado um campo magnético (quando  $T_N \rightarrow 0$ ).

Não obstante que as medidas com campo magnético sejam mais vantajosas de controlar que as medidas de pressão, até o momento não existem muitos trabalhos que tenham sido realizados com este método, devido principalmente ao alto custo que estes representam. Apresentamos alguns sistemas estudados com este parâmetro de controle:

- 1.  $CeCu_{6-x}Ag_x$ , que foi o primeiro sistema estudado com este parâmetro de controle [28]. Quando  $x = 0.8$  encontra-se que a  $T_N = 0.74$  K, este composto apresenta um campo crítico  $B_c = 2.3$  T. A figura 2.4 mostra o diagrama de fase  $T$  vs  $P$  para este sistema.



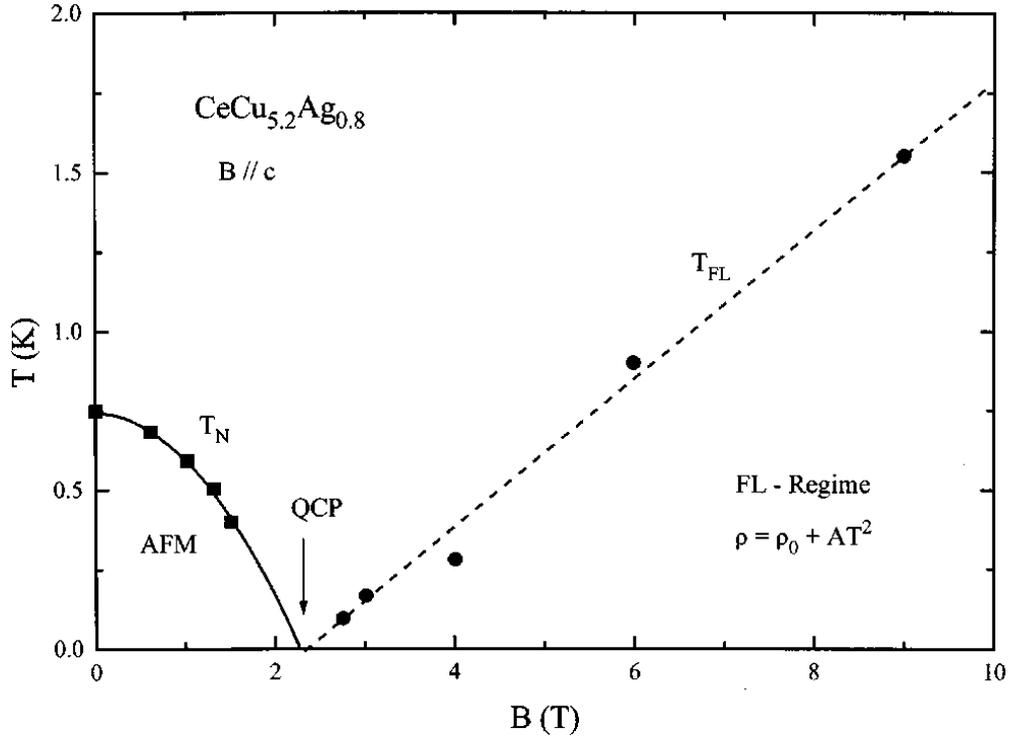


Figura 2.4: Diagrama de fase do composto  $CeCu_{5.2}Ag_{0.8}$ . Observe-se que com o aumento do campo magnético, a temperatura de Neel  $T_N$  diminui, até atingir  $T_N \rightarrow 0K$  num campo crítico  $\sim 2.3T$ . Acima do QCP observe-se que temperatura de coerência ( $T_{FL}$ ) cresce linearmente com o campo aplicado. Um comportamento NFL é observado abaixo desta linha. Resultado reproduzido da referência [28].

- 2.  $YbCu_{5-x}Al_x$ , que é estudado para  $x = 1.6$  ( $T_N = 0.25K$ ) e  $x = 1.7$  ( $T_N = 0.55K$ ). O campo crítico é encontrado em 2.0 e 2.5T respectivamente. Quando o campo é incrementado sob o  $B_c$ , um estado FL é reportado. Nesse estado a resistividade tem o comportamento  $\rho = \rho_0 + AT^2$ , sob um regime de temperatura que cresce monotonicamente com o campo. O coeficiente  $A$  é muito grande no  $B_c$  e decresce rapidamente com o incremento do campo [30].
- 3.  $CeCu_{5.8}Au_{0.2}$ , que apresenta características similares ao primeiro sistema, nos resultados de resistividade. Mas, o calor específico deste composto no campo crítico  $B_c = 0.5T$  (transição AF), obedece à  $C \propto AT^{0.5}$  (regime NFL) [31].

## 2.5 Férmions pesados e Supercondutividade sob pressão

Como já vimos nas seções anteriores, um fato muito interessante se apresenta em alguns compostos intermetálicos quando se quer atingir o  $T_N \rightarrow 0$  por variação de pressão. Dentro da pesquisa experimental desses sistemas, tem-se reportado que alguns destes apresentam supercondutividade perto do ponto crítico quântico  $P_c$ . Detalhamos alguns compostos que apresentam esta característica:

- 1. Dentro da família de compostos intermetálicos  $Ce(MT)_2Si_2$  (onde  $MT$  é um metal de transição e  $MN$  é um metal nobre), só os compostos  $CeCu_2Si_2$ ,  $CeRh_2Si_2$  e  $CePd_2Si_2$  desenvolvem supercondutividade sob efeito de uma pressão externa de  $P=0, 0.9$  e  $2.7\text{GPa}$  respectivamente. Além disso, o composto  $CeCu_2Si_2$  apresenta supercondutividade na pressão ambiente ( $T_{SC} = 0.64\text{K}$ ,  $P=0$ ) [9],  $T_{SC}$  é a temperatura crítica supercondutora, sendo este o mais estudado. A temperaturas abaixo de  $1\text{K}$ , este férmion pesado desenvolve diversos estados fundamentais, quando pequenas variações estequiométricas acontecem em sua composição. Um estudo sistemático deste fato pode ser mostrado no composto  $CeCu_{2+y}Si_{2-y}$ , no qual um pequeno excesso de  $Cu$  ( $y=+0.01$ ) estabiliza uma fase supercondutora a  $T_{SC} = 0.65\text{K}$ , ao contrário ( $y = -0.02$ ) induz à formação de um estado AF. As propriedades físicas destes compostos apresentam também diferentes comportamentos abaixo do efeito da pressão  $P$  e do campo magnético  $B$ , revelando um complexo diagrama de fase no espaço  $H,P,T$  [32].
- 2. Na escala de pressões críticas crescentes, o  $CeRh_2Si_2$  é o seguinte da família  $Ce(MT)_2Si_2$  que apresenta supercondutividade a  $T_{SC} = 0.35\text{K}$  já que este estado é atingido abaixo de uma pressão de  $P_c = 0.9\text{GPa}$  [33]. A pressão nula

este composto apresenta a maior temperatura de ordem AF ( $T_N = 36\text{K}$ ) na família dos  $CeMT_2Si_2$  [34].

- 3.  $CePd_2Si_2$ , ( $T_N = 10.2\text{K}$ ) seu estado supercondutor é alcançado a uma pressão de  $P = 2.7\text{GPa}$  [35] e a uma temperatura  $T_{SC} = 0.5\text{K}$ . Nestas condições de pressão, a resistividade do estado normal ( $T > T_{SC}$ ) deste material apresenta a dependência  $\rho \propto T^{1.2}$  [35], característico dos sistemas NFL. Na figura 2.3, mostra-se o diagrama de fase  $T$  vs  $P$  deste composto, onde destaca-se o surgimento de supercondutividade na região de pressão compreendida entre 22-31kbar.

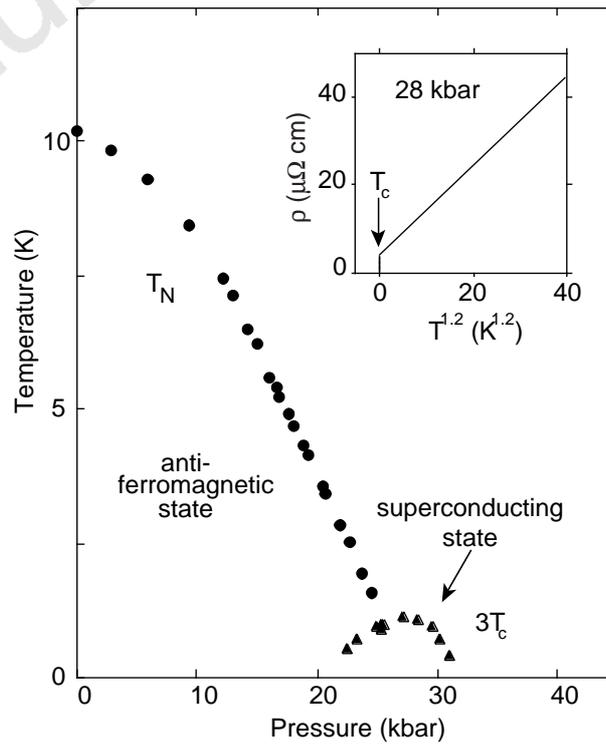


Figura 2.5: Diagrama de fase  $T$ - $P$  do composto  $CePd_2Si_2$ . Para maior clareza, o valor de  $T_c$  está sendo multiplicado por um fator 3. Observa-se que a supercondutividade aparece abaixo de uma temperatura crítica  $T_c$ , numa região onde a  $T_N \rightarrow 0$ . No quadro interno, tem-se  $\rho$  vs  $T^{1.2}$  para  $P=2.8\text{GPa}$ . Figura reproduzida da referência [35].

# Capítulo 3

## Modelos para sistemas de férmions pesados

### 3.1 Introdução

Os tratamentos teóricos capazes de incorporar os efeitos da interação elétron-elétron na descrição dos sistemas de muitos corpos são muito difíceis. Por mais simples que seja o modelo, a obtenção de sua solução para o estudo das propriedades físicas do sistema não é trivial. Só em uma dimensão, os procedimentos teóricos disponíveis permitem um estudo “exato” e sistemático dos modelos. Em duas ou três dimensões torna-se complicado saber, de forma exata, se um modelo é capaz de descrever um fenômeno físico dado ou se, por outro lado, uma predição teórica é verdadeira ou apenas reflete um artefato introduzido pela aproximação utilizada na resolução do problema. Essas dificuldades têm origem na natureza não perturbativa do problema, pois em geral, o termo de interação não é pequeno e não podemos usá-lo como parâmetro (pequeno) numa expansão perturbativa.

Entre estes tratamentos podemos distinguir dois grandes grupos: os numéricos e os analíticos. No primeiro grupo, destacam-se a técnica de Lanczos, os métodos de Monte-Carlo quântico e a expansão em séries. No segundo grupo, destacam-se

a teoria do grupo de renormalização, as técnicas de bosonização dos operadores de spin (incluindo a teoria das ondas de spin convencional e de bósons de Schwinger) e os métodos de partículas auxiliares para os modelos eletrônicos (férmions e bósons escravos). Cada técnica tem em maior ou menor medida alguma deficiência. No caso dos métodos numéricos, a diagonalização exata se limita a redes muito pequenas, o método Monte-Carlo sofre o problema do sinal, característico dos sistemas frustrados e de férmions, e as expansões em séries dependem sensivelmente das configurações de partida. Entre os analíticos, a teoria do grupo de renormalização é pouco eficiente para a descrição de fenômenos que ocorrem a distâncias da ordem do parâmetro de rede, e as técnicas de bosonização no contínuo estão limitadas a sistemas unidimensionais. Por outro lado, os métodos de bósons de Schwinger e de partículas auxiliares precisam de um tratamento de campo médio, o qual os converte em aproximações pouco controláveis na prática.

Resumindo, pode se concluir dizendo que, mesmo com o desenvolvimento tecnológico (computadores muitos potentes e rápidos para as análises numéricas) assim como as diversas ferramentas analíticas existentes (diversas técnicas de grupos de renormalização, teoria de campos da matéria condensada, etc.) na atualidade, o entendimento completo da física dos sistemas fortemente correlacionados está muito longe de ser alcançado totalmente e, só aproximações dos diversos modelos teóricos existentes podem ser considerados. Nosso trabalho está nessa direção de considerar um modelo simplificado do Hamiltoniano da rede de Kondo<sup>1</sup>, a fim de poder encontrar seus diversos diagramas de fase<sup>2</sup>. Para isso é importante entender primeiramente a física deste sistema, que é o propósito principal deste capítulo.

---

<sup>1</sup>Esse modelo chamado de “Hamiltoniano colar de Kondo” será estudado com detalhe no capítulo 5.

<sup>2</sup>Veremos no capítulo 5 que esses diagramas dependem em grande medida da dimensão espacial.

## 3.2 O efeito Kondo

Já se sabe há algumas décadas, que um grande número de ligas magnéticas diluídas, como *Cr*, *Ni Mn* e *Fe* diluídos em *Cu*, *Al*, *Ag*, *Au*, *Mg* (metais não magnéticos) apresentam um fenômeno interessante, a existência de um mínimo na resistividade  $\rho$  em função da temperatura<sup>3</sup>. Sabe-se também, experimentalmente, que estas ligas apresentam uma forte dependência da susceptibilidade  $\chi$  com a temperatura, ou seja, há formação de momento localizado. Já para ligas que não apresentam esta dependência na susceptibilidade o mínimo não é observado, sugerindo que este é consequência direta da interação entre o momento localizado e os elétrons de condução. Na figura 3.1 pode se observar este efeito, o incremento anômalo da resistência elétrica a baixas temperaturas é descrito aproximadamente como  $\ln(1/T)$  e no regime intermediário como  $\rho(T) = \rho_0 - aT^2$  perto a  $T = 0$ .

Em 1964, Jun Kondo explicou este fenômeno usando teoria de perturbação de segunda ordem no Hamiltoniano de interação *s-d* [36]. Desde então este problema foi chamado de *efeito Kondo*. O Hamiltoniano de interação *s-d* pode ser escrito como:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{sd} &= -\frac{2J}{N} \sum_{q_i} e^{-iq_i} s_i \cdot S \\ &= -\frac{J}{N} \sum_{kk'} [(a_{k'\uparrow}^\dagger a_{k\uparrow} - a_{k'\downarrow}^\dagger a_{k\downarrow}) S_z + a_{k'\uparrow}^\dagger a_{k\downarrow} S_- + a_{k'\downarrow}^\dagger a_{k\uparrow} S_+] \end{aligned} \quad (3.1)$$

onde  $s$  e  $S$  representam os spins dos elétrons de condução e dos spins localizados respectivamente. Na primeira equação, o fator de fase vem da interação local: elétrons de condução devem ter amplitude na posição do átomo impuro.  $J$  é o parâmetro de troca entre os spins dos elétrons de condução e os momentos localizados. Usando

<sup>3</sup>A resistividade decresce lentamente com a temperatura seguindo a lei  $1 + aT^2$  (a temperaturas da ordem de 10K), chegando a um valor finito quando  $T = 0$ .

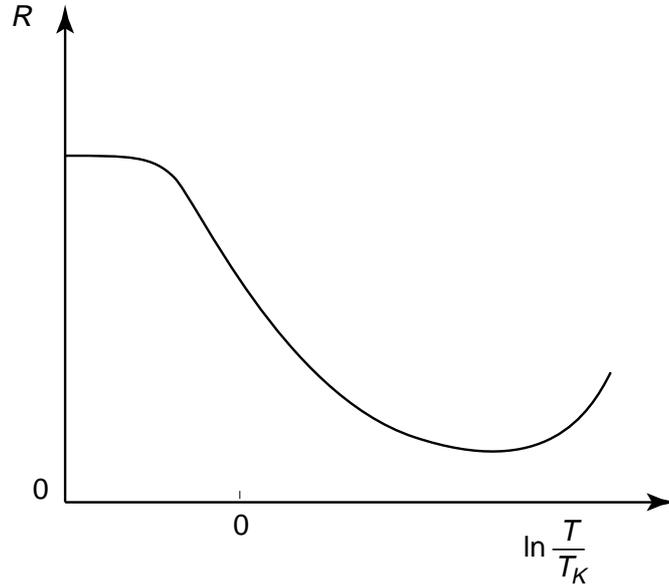


Figura 3.1: O efeito Kondo.

$s \cdot S = s_z S_z + \frac{1}{2}(s_+ S_- + s_- S_+)$  e considerando a notação da segunda quantização,  $\frac{1}{2}(a_{k\uparrow}^\dagger a_{k\uparrow} - a_{k\downarrow}^\dagger a_{k\downarrow}) = s_z$ ,  $a_{k\uparrow}^\dagger a_{k\downarrow} = s_+$ ,  $a_{k\downarrow}^\dagger a_{k\uparrow} = s_-$  chegamos a segunda equação (3.1).

Kondo considerou este Hamiltoniano como um potencial de perturbação, assumindo que  $J$  pode ter valores tanto positivos quanto negativos, ao considerar o termo de “mistura covalente”<sup>4</sup>. Mostrou, assim, que a contribuição à resistividade, devido ao espalhamento dos elétrons de condução pela impureza é:

$$R = R_B \left[ 1 + 4JN(E_F) \ln \frac{k_B T}{D} \right] \quad (3.2)$$

onde  $N(E_F)$ ,  $k_B$  e  $D$  são a densidade de estado no nível de Fermi, a constante de Boltzman e a largura da banda de condução respectivamente. Esta equação pode explicar o mínimo da resistividade destes materiais em função de  $T$ :

<sup>4</sup>Este termo entre o elétron  $f$  e os elétrons de condução, para compostos que não apresentam ordenamento magnético (quando tratada usando teoria de muitos corpos), resulta na formação de um pico na densidade de estado ao nível de Fermi, chamado de *pico ressonante de Kondo* [37].

- (1) A resistividade das ligas magnéticas diluídas decresce rapidamente devido à perda por espalhamento de fônons (com impurezas) a baixas temperaturas:  $R \propto T^5$ .
- (2) Para o caso  $J < 0$  (interação AF), a equação (3.2) revela que a resistividade se incrementa logaritmicamente com o decréscimo da temperatura:  $R \propto -\ln T$ . Assim, no diagrama  $T$  vs  $R$  existirá uma região de resistividade mínima a uma certa baixa temperatura. Portanto, a interação AF entre os spins dos elétrons de condução e os momentos localizados terá um efeito de suma importância para explicar o mínimo da resistividade.

Dessa forma, Kondo explicou o aumento logarítmico na resistividade, com o decréscimo da temperatura, observado para vários sistemas que apresentam momento localizado. Porém, na equação (3.2) observa-se uma divergência quando a temperatura tende a zero.

É importante notar que a equação (3.2) é obtida considerando-se um modelo perturbativo de segunda ordem e outros termos de mais alta ordem podem vir a ser importantes com o decréscimo da temperatura. Usando o método da soma infinita de Abrikosov [38], Kondo [39] indicou que para  $J > 0$ , a resistividade decresce monotonicamente e tende a zero com  $T \rightarrow 0$ , mas para  $J < 0$ , diverge com  $T$  para  $T = T_K$  onde:

$$k_B T_K = D \exp\left(-\frac{1}{2|J|N(E_F)}\right) \quad (3.3)$$

onde  $N(E_F)$  é a densidade de estado no nível de Fermi e  $T_K$  é a temperatura de Kondo. O significado físico desta temperatura é: temperatura de formação do estado spin singleto através do acoplamento AF entre os spins dos elétrons de condução e os momentos localizados.

Embora este fenômeno tenha sido reportado na década do 30, não existia nenhum progresso teórico até que Kondo sugeriu, em 1964, sua idéia baseada no modelo  $s-d$ . Depois dessa data, por muitos anos se tentou obter uma solução exata para o problema de Kondo. Em 1975 K. G. Wilson resolveu este problema usando a teoria de grupo de renormalização numérico, e em 1984 este foi também resolvido exatamente por Andrei et. al. [41] usando o ansatz de Bethe; neste trabalho mostrou-se que o modelo proposto por Kondo explica, razoavelmente bem, o comportamento das propriedades magnéticas e de transporte de sistemas magnéticos diluídos para  $T > T_K$ <sup>5</sup>

### 3.3 A interação RKKY

Um importante mecanismo de acoplamento magnético entre os momentos localizados em metais depende da habilidade dos elétrons de condução em interagir, magneticamente, com os momentos localizados e se propagarem entre diferentes sítios magnéticos. O modo em que os elétrons podem se polarizar e se propagar foi mostrado inicialmente por Ruderman e Kittel [42]. Eles calcularam os termos de segunda ordem para a energia usando o Hamiltoniano  $s-d$  como perturbação. Kasuya [43] e Yosida [44] desenvolveram a teoria para interações do tipo  $s-f$  e  $s-d$ . O mecanismo passou a se chamar teoria RKKY. Esta polarização de spin decai como  $1/r^3$  (em  $d = 3$ ) a distâncias grandes, oscilando com um período  $1/2k_F$  (onde  $r$  e  $k_F$  são a distância do spin localizado e o número de onda de Fermi, respectivamente). Esta oscilação é conhecida como oscilação de Friedel, e é a “pedra filosofal” para o entendimento da interação RKKY. Portanto, pode se resumir dizendo que a interação RKKY é uma interação inter-sítio entre os momentos localizados, mediada pelos elétrons de condução. Esta pode ser descrita como:

---

<sup>5</sup> $T_K$  é a temperatura de crossover entre o regime magnético e o não magnético da impureza.

$$\mathcal{H}_{RKKY} = -\frac{9(N_C J)^2 \pi}{8E_F} \sum_{\langle ij \rangle} \frac{\mathbf{S}_i \mathbf{S}_j}{r_{ij}^3} \left[ 2k_F \cos(2k_F r_{ij}) - \frac{\sin(2k_F r_{ij})}{r_{ij}} \right] \quad (3.4)$$

onde  $\mathbf{S}_i$ ,  $\mathbf{S}_j$ ,  $N_C$ ,  $r_{ij}$  e  $k_F$  são o momento localizado no  $i$ -ésimo sítio, o momento localizado no  $j$ -ésimo sítio, a densidade dos elétrons de condução, a distância entre os momentos localizados e o número de ondas de Fermi, respectivamente. Esta interação spin-spin é variada e muda seu sinal dependendo da distância entre o par de spins, portanto existe um comportamento oscilatório o qual, como já foi dito é originado das oscilações de Friedel.

É importante observar também que  $\mathcal{H}_{RKKY}$  é proporcional ao produto  $N(E_F)J^2$ , de modo que a energia da interação RKKY, a qual podemos representar por uma temperatura característica  $T_{RKKY}$ , pode ser escrita como:

$$T_{RKKY} = CN(E_F)J^2 \quad (3.5)$$

onde  $C$  é uma constante. Em geral, torna-se uma densidade de estados  $N(E)$  rectangular constante ( $N(E_F) = 1/W$ ) de  $E = 0$  a  $E = W$  e nula fora deste intervalo.

### 3.4 Competição entre o efeito Kondo e a interação RKKY

Como vimos acima, tanto a temperatura de Kondo (equação (3.3)), quanto a temperatura característica da interação RKKY (equação (3.5)), podem ser descritas em função do parâmetro  $|J|N(E_F)$ . Doniach [3] mostrou que em sistemas Kondo concentrados<sup>6</sup> esta dependência leva a uma competição entre estes dois efeitos, a qual resulta em diferentes estados magnéticos, dependendo do valor de  $|J|N(E_F)$ .

<sup>6</sup>Compostos intermetálicos de  $Ce$ ,  $U$  e  $Yb$  que apresentam dependência logarítmica da resistividade elétrica com a temperatura.

Para  $|J|N(E_F)$  pequeno  $T_{RKKY}$  é maior que  $T_K$ , a interação RKKY é dominante e, portanto, um estado magneticamente ordenado é esperado. Quando  $|J|N(E_F)$  aumenta, tanto  $T_{RKKY}$  quanto  $T_K$  aumentam, porém, a temperatura de Kondo o faz mais rapidamente, devido à sua dependência exponencial, resultando em um aumento na blindagem do momento magnético localizado pelos elétrons de condução e conseqüente redução no momento magnético efetivo.

Considerando que a temperatura de ordenamento magnético  $T_M$  é proporcional ao momento efetivo ao quadrado e a  $T_{RKKY}$ , ou seja [3, 45]:

$$T_M \approx \mu_{eff}^2 T_{RKKY} \quad (3.6)$$

A redução do momento efetivo, provocado pelo aumento do efeito Kondo, resulta em uma diminuição na temperatura de ordenamento.

Usando a aproximação de campo médio, e considerando o estado fundamental do sistema com spin efetivo  $S = 1/2$ , Doniach mostrou que o momento efetivo de sistemas Kondo, é dado por :

$$\mu_{eff} \approx \sqrt{1 - (JN(E_F))^2} \quad (3.7)$$

e assim, para  $|J|N(E_F)$  igual ou maior que um valor crítico  $|JN(E_F)|_c$ ,  $T_M$  se anula, e um estado não ordenado magneticamente é obtida.

Para o modelo usado por Doniach, observa-se que  $|J|N(E_F)_c \cong 1$ , porém, pesquisas mais recentes [46], nos quais incluiu-se a degenerescência do estado  $f$ , mostraram que este valor é reduzido por um fator  $1/(g \ln g)$ , onde  $g$  é a degenerescência do estado fundamental.

Na figura (3.2) mostra-se um diagrama de fase proposto por Doniach no qual observa-se a dependência de  $T_K$  e  $T_{RKKY}$  em função basicamente do parâmetro  $|J|$  (o correto seria  $|J|N(E_F)$ ), neste diagrama podemos observar que, ao promovermos

mudanças no produto  $|J|N(E_F)$ , podemos modificar o peso de ambas interações, mudando assim o estado fundamental do sistema.

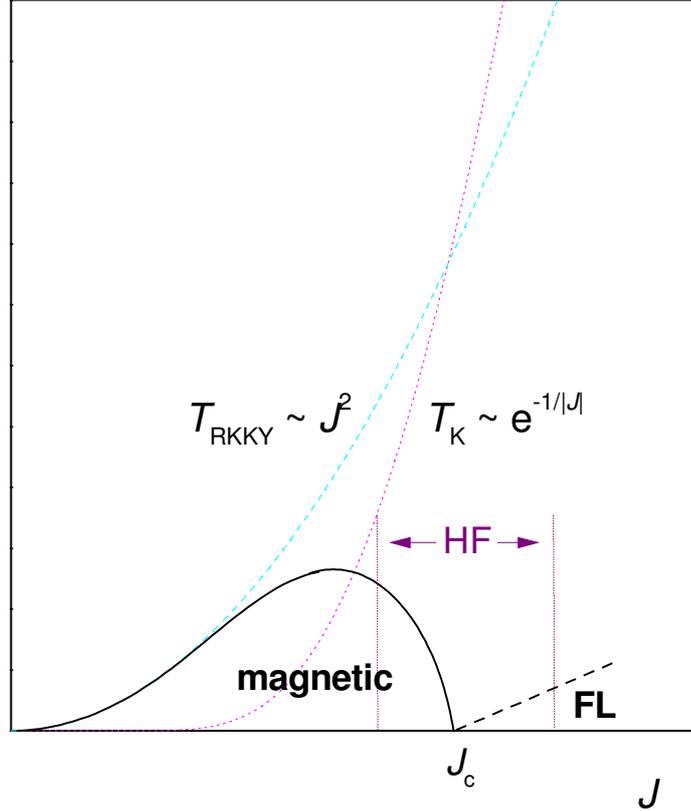


Figura 3.2: Diagrama de fase de Doniach, HF representa o campo de ação dos férmions pesados, FL denota a região líquido de Fermi. As linhas pontilhadas representam as temperaturas de Kondo e da interação RKKY. A linha pontilhada que sai de  $J_c$  representa a linha de coerência, abaixo da qual o sistema apresenta comportamento FL. Figura reproduzida da referência [35].

Lavagna et. al. [47, 48] mostraram que  $|J|N(E_F)$  apresenta uma forte dependência com o volume da célula unitária, de modo que é possível alterar este parâmetro aplicando pressão sobre o sistema<sup>7</sup>, ou pelo processo de substituição química. Este modelo tem sido aplicado com êxito para explicar vários dos resultados experimentais obtidos no estudo de compostos intermetálicos de  $Ce$  e  $U$ ,

<sup>7</sup>Como se viu experimentalmente no capítulo anterior.

como se mostrou no capítulo anterior.

No entanto, anomalias nas propriedades de transporte têm sido observadas para alguns compostos, como a drástica mudança no comportamento da resistividade elétrica em função da temperatura. Ao resfriarmos estes sistemas, a resistividade inicialmente aumenta com uma dependência  $-\ln(T)$ , característica do efeito Kondo, e é subitamente reduzida, apresentando um máximo em  $T = T_{max}$ . Para muitos destes compostos tem sido observado também uma dependência com  $T^2$  para  $T \ll T_{max}$ .

Este efeito, o qual recebeu o nome de *efeito de coerência*, não pode ser explicado considerando o sistema concentrado como um conjunto de impurezas Kondo independentes, sendo necessário considerar que os íons magnéticos não estão aleatoriamente distribuídos, mas sim dispostos em um arranjo periódico regular, e podemos considerar o sistema como sendo formado por uma rede de impurezas tipo Kondo. Por isto, tais compostos são denominados rede de Kondo. Na seguinte seção estudaremos isso ao definir a rede de Kondo mais propriamente dita, como um modelo teórico essencial para estudar os férmions pesados.

### 3.5 Modelo da rede de Kondo

O Hamiltoniano básico que descreve a física dos férmions pesados é o Hamiltoniano da rede de Kondo (KLM, do inglês “Kondo lattice model”), o qual toma em consideração a competição entre o efeito Kondo e a interação RKKY. Este pode ser descrito como:

$$\mathcal{H}_{KLM} = \sum_{k,\sigma} \epsilon_k c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma} + J \sum_{i \neq j} \mathbf{S}_i \cdot \sigma, \quad (3.8)$$

onde o primeiro termo descreve a banda dos elétrons de condução de spin  $\sigma$  e largura

$W$  e o segundo a interação entre os momentos magnéticos desses elétrons e dos elétrons  $f$  localizados,  $\mathbf{S}_i$  é o spin do elétron  $f$  localizado no sítio  $i$  de uma rede regular. Muitos pesquisadores vêm trabalhando neste modelo, mas a solução exata ainda não foi obtida. Só existem soluções para casos limites, como  $J = \infty$  ou  $J$  pequeno.

Um dos assuntos essenciais da rede de Kondo é entender como levar em conta a razão ( $J/W$ ) em cada situação. O ponto crítico quântico é um exemplo disto. Como vimos no capítulo anterior, este se caracteriza por ser o ponto onde uma transição de fase a temperatura zero acontece.

Continentino et. al. construíram uma teoria de escala [15, 45], a partir da existência do QCP, a qual descreve as propriedades desses materiais na proximidade desta transição, e indicaram que esta teoria é completamente geral e não reflete apenas um modelo particular<sup>8</sup>. Isto porque apenas se baseia na existência do ponto crítico quântico. Em três dimensões, e no estado fundamental ( $T = 0$ ), abaixo de um valor crítico da razão ( $J/W$ ) (isto é, para  $(J/W) < (J/W)_c$ ), a interação RKKY prevalece e o estado fundamental do sistema é magnético. Para  $(J/W) > (J/W)_c$  por outro lado, a blindagem Kondo é dominante e o estado fundamental é não magnético. A transição de fase em  $T = 0$ ,  $(J/W) = (J/W)_c$  é uma transição magnética de um estado fundamental AF com uma magnetização “staggered” (escalonada)  $m_s \neq 0$ , a um estado não magnético com  $m_s = 0$ . Esta transição é de segunda ordem<sup>9</sup> e, a temperatura zero, o parâmetro de ordem  $m_s$  desaparece continuamente no ponto crítico quântico como  $m_s \propto |g|^\beta$  [8], onde  $g = (J/W) - (J/W)_c$  mede a distância ao QCP e  $\beta$  é um expoente crítico. No lado crítico do diagrama de fase ( $(J/W) < (J/W)_c$ ), existe uma linha da transição

<sup>8</sup>Como acontece no modelo da rede de Kondo ou o modelo periódico de Anderson [49] (PAM, do inglês “Periodic Anderson Model”).

<sup>9</sup>Como à temperatura zero não existem flutuações térmicas, então as flutuações quânticas se tornam predominantes. Transições a temperatura finita são chamadas “clássicas” mesmo quando envolvem sistemas essencialmente quânticos como hélio líquido e supercondutores.

de segunda ordem, que associa a temperatura de Neel com um valor dado da razão  $J/W$ . Esta linha desaparece no QCP como:

$$T_N = |g|^\psi \quad (3.9)$$

o qual define o expoente de deslocamento  $\psi$ . A figura 3.3 mostra um diagrama de fase onde se apresentam os diversos comportamentos preditos por esta teoria.

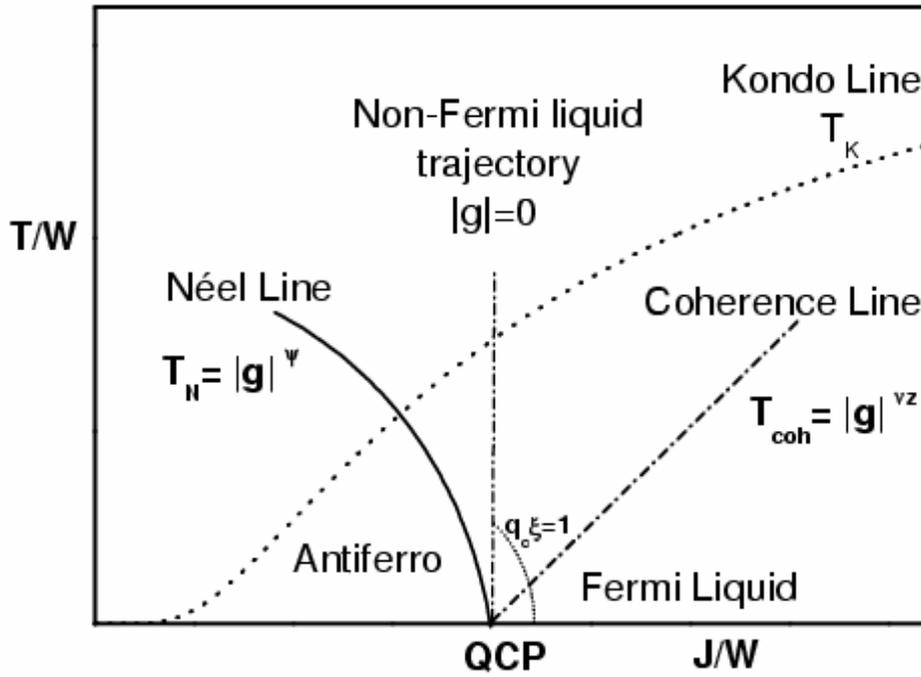


Figura 3.3: Diagrama de fase de um férmion pesado, mostrando a linha de coerência, a linha crítica e os diferentes estados líquido de Fermi e não-líquido de Fermi. A linha  $q_C \xi = 1$ , separa o regime local do regime crítico verdadeiro. Figura reproduzida da referência [8].

A teoria de escala pode ser resumida na expressão para a densidade de energia livre perto do QCP,

$$f \propto |g|^{2-\alpha} F \left[ \frac{T}{T_{coh}}, \frac{H}{|g|^{\beta+\gamma}}, \frac{h}{h_c} \right] \quad (3.10)$$

onde  $F[x, y, z]$  é uma função de escala a qual depende da temperatura  $T^d$ , do campo magnético “staggered”  $H$  conjugado de  $m_s$  e o campo externo uniforme  $h$ . A temperatura de coerência é definida como  $T_{coh} = |g|^{\nu z}$ . Esta temperatura encontra-se no lado não crítico do diagrama de fase. O campo externo é definido como  $h_c = |g|^{\phi_h}$ , onde  $\phi_h$  é um expoente crítico independente. Os expoentes  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$ ,  $\nu$  e  $z$ , são expoentes críticos a temperatura zero, e que obedecem relações de escala como,  $\alpha + 2\beta + \gamma = 2$ . Finalmente, os expoentes  $z$  e  $\nu$  são chamados de expoente dinâmico crítico e expoente de comprimento de correlação, respectivamente. Estes representam uma classe universal de expoentes que escalam as propriedades e grandezas físicas na região crítica quântica.

No capítulo 5 levaremos em conta esta teoria de escala para poder obter os diversos diagrama de fase do modelo colar de Kondo, assim como o comportamento da linha crítica de Neel em função do expoente de deslocamento  $\psi$ .

# Capítulo 4

## Operadores de Sachdev

### 4.1 Introdução

Os operadores de enlace (bond-operators) têm como base o trabalho de S. Sachdev e N. R. Bhatt [4] de 1989. Eles introduziram uma nova representação dos operadores de spin-1/2, com a finalidade de entender as propriedades do estado dimerizado<sup>1</sup>, e ilustraram o método aplicando-o ao Hamiltoniano de Heisenberg quântico AF bi-dimensional frustrado proposto por Gelfand et. al. [50].

O objetivo deste capítulo é demonstrar como estes novos operadores surgem, assim como as propriedades que satisfazem. Ao final apresentamos uma breve coleção de alguns trabalhos feitos tendo como base esta nova representação de operadores de spins.

### 4.2 Os operadores de enlace

Sabe-se, que na descrição da mecânica quântica o spin  $\mathbf{S}_i$  (localizado no sítio  $i$ ) já não é mais um vetor, mas um operador vetorial cujas componentes  $S_{ix}$ ,  $S_{iy}$  e  $S_{iz}$

---

<sup>1</sup>Um estado dimerizado consiste numa cobertura da rede com singletos formados por pares de spins.

são os geradores do grupo  $SU(2)$ , semelhante em forma, ao grupo  $SO(3)$ . Portanto, os mesmos satisfazem as típicas regras de comutação de um momento angular<sup>2</sup>:

$$\begin{aligned} [\mathbf{S}_i^2, S_{ix}] &= [\mathbf{S}_i^2, S_{iy}] = [\mathbf{S}_i^2, S_{iz}] = 0 \\ [S_{i\alpha}, S_{j\beta}] &= i\epsilon_{\alpha\beta\gamma}\delta_{ij}S_{i\gamma}, \quad \mathbf{S}_i^2 = S(S+1). \end{aligned} \tag{4.1}$$

onde  $\epsilon_{\alpha\beta\gamma}$  é o tensor completamente anti-simétrico e os sub-índices  $\alpha$ ,  $\beta$  e  $\gamma$  se referem as componentes  $x$ ,  $y$  e  $z$  dos operadores de spin.

Consideremos agora dois operadores de spin-1/2,  $\mathbf{S}_1$  e  $\mathbf{S}_2$ , tal que seu Hamiltoniano é descrito por:

$$\mathcal{H} = J\mathbf{S}_1\mathbf{S}_2 \tag{4.2}$$

onde  $J < 0$  no caso FR e  $J > 0$  quando temos AF. Demonstraremos depois que estes operadores representados em função dos estados singleto e tripleto satisfazem as mesmas regras de comutação especificadas acima.

Os quatro estados no espaço de Hilbert,  $|\uparrow\uparrow\rangle, |\downarrow\downarrow\rangle, |\uparrow\downarrow\rangle$  e  $|\downarrow\uparrow\rangle$ , podem ser combinados para formar o estado singleto  $|s\rangle$  e os três estados excitados (considerando  $J > 0$ ) que formam o tripleto  $|t_x\rangle, |t_y\rangle$  e  $|t_z\rangle$ . Portanto, podemos definir operadores de criação que criam os estados singleto e tripleto a partir do vácuo  $|0\rangle$ , através de:

$$\begin{aligned} |s\rangle &= s^\dagger|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle), \\ |t_x\rangle &= t_x^\dagger|0\rangle = \frac{-1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\uparrow\rangle - |\downarrow\downarrow\rangle), \\ |t_y\rangle &= t_y^\dagger|0\rangle = \frac{i}{\sqrt{2}}(|\uparrow\uparrow\rangle + |\downarrow\downarrow\rangle), \\ |t_z\rangle &= t_z^\dagger|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle) \end{aligned} \tag{4.3}$$

---

<sup>2</sup>Onde estamos usando a convenção  $\hbar$  e  $\mu_B = 1$  (magneton de Bohr).

onde as setas do lado esquerdo e direito no ket representa os spins dos elétrons de condução e dos momentos localizados respectivamente. O objetivo é demonstrar que se pode escrever os operadores de spin  $\mathbf{S}_1$  e  $\mathbf{S}_2$  em termos dos operadores  $s$ ,  $t_x$ ,  $t_y$  e  $t_z$ . Nesse ponto é mais simples pensar que  $s$  e  $t_\alpha$  criam e aniquilam partículas. Então:

$$\begin{aligned}
 s^\dagger|0\rangle &= |s\rangle \quad (\text{cria uma partícula singleto}) \\
 s|0\rangle &= 0 \quad (\text{o vácuo é a ausência de partículas}) \\
 s^\dagger|t_\alpha\rangle &= |s, t_\alpha\rangle \quad (\text{esse estado fisicamente não existe}) \\
 s|t_\alpha\rangle &= 0 \\
 s^\dagger|s\rangle &= (s+1)|s+1\rangle \quad (\text{cria mais uma partícula singleto}) \\
 s|s\rangle &= (s-1)|s-1\rangle = |0\rangle
 \end{aligned} \tag{4.4}$$

Para conseguir escrever  $\mathbf{S}$  em função de  $s$  e  $t_\alpha$  vamos considerar a aplicação de  $\mathbf{S}$  nos estados  $|s\rangle$  e  $|t_\alpha\rangle$ . Lembrando que:

$$\begin{aligned}
 S_z|\pm\rangle &= \pm\frac{1}{2}|\pm\rangle, \\
 S_x|\pm\rangle &= \frac{1}{2}|\mp\rangle, \\
 S_y|\pm\rangle &= \pm\frac{i}{2}|\mp\rangle.
 \end{aligned} \tag{4.5}$$

Considerando somente a componente  $x$  de  $\mathbf{S}_1$ .

- Para o singleto  $s$ :

$$S_{1x}|s\rangle = S_{1x}\left[\frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle)\right] = -\frac{1}{2}\left[\frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\uparrow\rangle - |\downarrow\downarrow\rangle)\right] = \frac{1}{2}|t_x\rangle \tag{4.6}$$

Então,

$$S_{1x}|s\rangle = S_{1x}s^\dagger|0\rangle = \frac{1}{2}|t_x\rangle \tag{4.7}$$

Por outro lado:

$$\frac{1}{2}t_x^\dagger s s^\dagger |0\rangle = \frac{1}{2}|t_x\rangle \quad (4.8)$$

Logo:

$$S_{1x} \propto \frac{1}{2}t_x^\dagger s \quad (4.9)$$

- Para o estado excitado  $t_x$ :

$$S_{1x}|t_x\rangle = S_{1x}\left[-\frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\uparrow\rangle - |\downarrow\downarrow\rangle)\right] = \frac{1}{2}|s\rangle \quad (4.10)$$

Então,

$$S_{1x}|t_x\rangle = S_{1x}t_x^\dagger |0\rangle = \frac{1}{2}|s\rangle \quad (4.11)$$

Por outro lado:

$$\frac{1}{2}s^\dagger t_x t_x^\dagger |0\rangle = \frac{1}{2}|s\rangle \quad (4.12)$$

Logo:

$$S_{1x} \propto \frac{1}{2}s^\dagger t_x \quad (4.13)$$

- Para o estado excitado  $t_y$ :

$$S_{1x}|t_y\rangle = S_{1x}\left[\frac{i}{\sqrt{2}}(|\uparrow\uparrow\rangle + |\downarrow\downarrow\rangle)\right] = \frac{i}{2}|t_z\rangle \quad (4.14)$$

Então,

$$S_{1x}|t_y\rangle = S_{1x}t_y^\dagger |0\rangle = \frac{i}{2}|t_z\rangle \quad (4.15)$$

Por outro lado:

$$\frac{i}{2}t_z^\dagger t_y t_y^\dagger |0\rangle = \frac{i}{2}|t_z\rangle \quad (4.16)$$

Logo:

$$S_{1x} \propto \frac{i}{2} t_z^\dagger t_y \quad (4.17)$$

- Para o estado excitado  $t_z$ :

$$S_{1x}|t_y\rangle = S_{1x}\left[\frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle)\right] = -\frac{i}{2}|t_y\rangle \quad (4.18)$$

Então,

$$S_{1x}|t_z\rangle = S_{1x}t_z^\dagger |0\rangle = \frac{-i}{2}|t_y\rangle \quad (4.19)$$

Por outro lado:

$$\frac{-i}{2}t_y^\dagger t_z t_z^\dagger |0\rangle = \frac{-i}{2}|t_y\rangle \quad (4.20)$$

Logo:

$$S_{1x} \propto -\frac{i}{2}t_y^\dagger t_z \quad (4.21)$$

Conclusão:  $S_{1x}$  pode ser escrito como :

$$S_{1x} = \frac{1}{2}(s^\dagger t_x + t_x^\dagger s - i(t_y^\dagger t_z - t_z^\dagger t_y)) \quad (4.22)$$

Lembrando que:

$$\epsilon_{\alpha\beta\gamma}t_\beta^\dagger t_\gamma = (\epsilon_{xyz}t_y^\dagger t_z + \epsilon_{xzy}t_z^\dagger t_y) \quad (4.23)$$

Finalmente:

$$S_{1x} = \frac{1}{2}(s^\dagger t_x + t_x^\dagger s - i\epsilon_{\alpha\beta\gamma}t_\beta^\dagger t_\gamma) \quad (4.24)$$

De fato já vimos que  $S_{1x}|s\rangle = 1/2|t_x\rangle$ . Agora substituindo  $S_{1x}$ :

$$\frac{1}{2}[s^\dagger t_x + t_x^\dagger s - i(t_y^\dagger t_z - t_z^\dagger t_y)]|s\rangle = \frac{1}{2}|t_x\rangle \quad (4.25)$$

Da mesma forma se demonstra para os estados  $|t_\alpha\rangle$ . Finalmente usando o mesmo raciocínio para as outras componentes de  $\mathbf{S}_1$  e  $\mathbf{S}_2$  e combinando os termos de uma

forma conveniente, podemos mostrar que a ação dos operadores de spin  $\mathbf{S}_1$  e  $\mathbf{S}_2$  nos estados singlete e tripleto nos leva à representação:

$$\begin{aligned} S_{1,\alpha} &= \frac{1}{2}(s^\dagger t_\alpha + t_\alpha^\dagger s - i\epsilon_{\alpha\beta\gamma} t_\beta^\dagger t_\gamma), \\ S_{2,\alpha} &= \frac{1}{2}(-s^\dagger t_\alpha - t_\alpha^\dagger s - i\epsilon_{\alpha\beta\gamma} t_\beta^\dagger t_\gamma), \end{aligned} \quad (4.26)$$

onde  $\alpha, \beta, \gamma$  tomam os valores de  $x, y, z$  e  $\epsilon$  é um tensor totalmente anti-simétrico.

### 4.3 Condição de estado físico possível

No espaço no qual estamos trabalhando (espaço de Fock) podemos criar qualquer estado possível. Por exemplo:

$$s^\dagger |t_\alpha\rangle = |s, t_\alpha\rangle \quad (4.27)$$

O estado  $|s, t_\alpha\rangle$  significa um estado singlete-triplete ao mesmo tempo. No entanto, este estado não é um estado fisicamente possível, pois, ou o sistema está no estado singlete ou no estado tripleto. Esta restrição nos leva então a seguinte condição:

$$s^\dagger s + \sum_\alpha t_\alpha^\dagger t_\alpha = 1 \quad (4.28)$$

onde  $\alpha = x, y, z$ ;  $s^\dagger s$  conta quantos estados singlete temos (0 ou 1), e  $t_\alpha^\dagger t_\alpha$  conta quantos estados tripleto temos (1 ou 0).

### 4.4 Relações de comutação entre os operadores de enlace

Desde que as relações de comutação bosônicas ou fermiônicas reproduzem de forma correta a álgebra dos spins  $\mathbf{S}_1$  e  $\mathbf{S}_2$  poderíamos adotar qualquer uma das duas, porém por uma questão de conveniência têm-se adotado as relações de comutação bosônicas. Ou seja:

$$[s, s^\dagger] = 1, [t_\alpha, t_\beta^\dagger] = \delta_{\alpha,\beta}, [s, t_\alpha^\dagger] = 0, \quad (4.29)$$

Por último, vamos verificar se a álgebra de  $\mathbf{S}_1$  e  $\mathbf{S}_2$  é satisfeita. Por exemplo a identidade  $[S_{1x}, S_{1y}] = iS_{1z}$ . Usando a representação de  $s$  e  $t_\alpha$ , temos:

$$\begin{aligned} [S_{1x}, S_{1y}] = & \frac{1}{4} \left( [s^\dagger t_x, s^\dagger t_y] + [s^\dagger t_x, t_y^\dagger s] + i[s^\dagger t_x, t_x^\dagger t_z] - i[s^\dagger t_x, t_z^\dagger t_x] \right. \\ & + [t_x^\dagger s, s^\dagger t_y] + [t_x^\dagger s, t_y^\dagger s] + i[t_x^\dagger s, t_x^\dagger t_z] - i[t_x^\dagger s, t_z^\dagger t_x] \\ & - i[t_y^\dagger t_z, s^\dagger t_y] - i[t_y^\dagger t_z, t_y^\dagger s] + [t_y^\dagger t_z, t_x^\dagger t_z] - [t_y^\dagger t_z, t_z^\dagger t_x] \\ & \left. + i[t_z^\dagger t_y, s^\dagger t_y] + i[t_z^\dagger t_y, t_y^\dagger s] - [t_z^\dagger t_y, t_x^\dagger t_z] + [t_z^\dagger t_y, t_z^\dagger t_x] \right) \quad (4.30) \end{aligned}$$

usando a identidade:

$$[AB, CD] = -[C, A]BD - A[C, B]D - C[D, A]B - CA[D, B]$$

encontramos:

$$\begin{aligned} [S_{1x}, S_{1y}] &= \frac{1}{4} (-t_y^\dagger t_x + i s^\dagger t_z + t_x^\dagger t_y + i t_z^\dagger s + i s^\dagger t_z - t_y^\dagger t_x + i t_z^\dagger s + t_x^\dagger t_y) \\ &= \frac{i}{2} (s^\dagger t_z + t_z^\dagger s - i(t_x^\dagger t_y - t_y^\dagger t_x)) = iS_{1z}. \quad (4.31) \end{aligned}$$

O mesmo raciocínio pode ser usado para mostrar:

$$\begin{aligned} [S_{1\alpha}, S_{1\beta}] &= i\epsilon_{\alpha\beta\gamma} S_{1\gamma}, & [S_{2\alpha}, S_{2\beta}] &= i\epsilon_{\alpha\beta\gamma} S_{2\gamma}, \\ [S_{1\alpha}, S_{2\beta}] &= 0, & \mathbf{S}_1^2 &= \frac{3}{4}, & \mathbf{S}_2^2 &= \frac{3}{4}, & S_1 \cdot S_2 &= -\frac{3}{4} s^\dagger s + \frac{1}{4} t_\alpha^\dagger t_\alpha. \quad (4.32) \end{aligned}$$

Essas são exatamente as propriedades esperadas no começo deste capítulo para os operadores de spin-1/2 do grupo  $SU(2)$ .

Existem na literatura já muitos trabalhos que utilizam os operadores de enlace de Sachdev para representar os operadores de spin. Escolhemos alguns desses para ter uma idéia mais ampla destes operadores que possam ser lembradas.

- Sachdev e Bhatt [4] foram os primeiros que propuseram uma representação dos operadores de spins-1/2, a fim de pesquisar as propriedades intrínsecas ou espontâneas da fase magneticamente desordenada dimerizada. Esta nova representação de um bóson de spin-1 foi usada para determinar o diagrama de fase de campo médio do Hamiltoniano de Heisenberg antiferromagnético quântico frustrado em uma rede quadrada [50].
- Em 1998 Deng-Ke Yu et. al. [51] utilizaram os operadores de enlace na aproximação de campo médio para estudar o modelo de Heisenberg AF de spin-1/2 de duas camadas. Eles encontraram que a transição de fase quântica (no estado fundamental) acontecia quando  $J_2/J_1 \approx 2.3$  (de acordo com o modelo  $\sigma$  não linear e Monte-Carlo quântico), onde  $J_1$  e  $J_2$  são as constantes de acoplamento intra-camada e inter-camada respectivamente.
- Em 1999 Han-Ting Wang et. al. [52] estudaram a magnetização da cadeia de Heisenberg isotrópica. Estes são representados seguindo a mesma linha que o trabalho de Sachdev para o spin-1/2.
- No 2000, Guan-Ming Zhang et. al [53] utilizaram os operadores de enlace para estudar o Hamiltoniano colar de Kondo no estado fundamental ( $T = 0$ ). Eles encontraram resultados para o QCP em duas e três dimensões de ótimo acordo com as técnicas de Monte-Carlo e expansão em séries. Este trabalho é a base desta dissertação como veremos no próximo capítulo.

- Christoph Jurecka e Wolfram Brenig [54] apresentaram a teoria de campo médio com os operadores de enlace para o modelo da rede de Kondo em duas e três dimensões. Eles obtiveram, que a  $T = 0$  o QCP em duas dimensões tem o valor de  $(J/t)_c \approx 1.505$  e em três dimensões  $(J/t)_c \approx 1.833$ .
- Em 2001, Sachdev [55] utilizou o formalismo dos operadores de enlace para descrever o estado fundamental e excitações dos isolantes de Mott dopados e os isolantes em duas dimensões.
- Neste ano surgiu o trabalho de Kazuo Hida et al. [56], no qual se utiliza o formalismo dos operadores de enlace na aproximação de campo médio, para pesquisar a magnetização “plateaux” em cadeias de Heisenberg dimerizadas de spin-1/2 em duas dimensões.

Vimos neste capítulo uma nova representação para os operadores de spin; no próximo capítulo usaremos estes para representar os spins-1/2 dos elétrons de condução e dos momentos localizados no Hamiltoniano colar de Kondo.

# Capítulo 5

## Diagramas de fases do Hamiltoniano colar de Kondo

Como vimos no capítulo 3, o Hamiltoniano da rede de Kondo<sup>1</sup> é um dos modelos essenciais para descrever a física dos férmions pesados. Este modelo consiste de dois tipos diferentes de elétrons, os elétrons localizados– $f$ , e os elétrons de condução (que se propagam como portadores de carga). Quando o nível de energia do orbital  $f$  se encontra na profundidade do mar de Fermi, e quando ao mesmo tempo a força de repulsão de Coulomb suprime fortemente a dupla ocupação do orbital  $f$  (limite Kondo), o grau de liberdade de carga dos elétrons– $f$  é extinguido. Assim o modelo da rede de Kondo pode ser descrito como:

$$\mathcal{H}_{KLM} = -t \sum_{\langle i,j \rangle} (C_{i,\sigma}^\dagger C_{j,\sigma} + h.c.) + J \sum_i \mathbf{S}_i \cdot C_{i,\alpha}^\dagger \boldsymbol{\sigma}_{\alpha\beta} C_{i,\beta}, \quad (5.1)$$

onde os elétrons– $f$  são reduzidos aos momentos localizados  $\mathbf{S}_i$ . O primeiro termo representa a banda de condução ( $C_{i,\sigma}^\dagger$  é o operador de criação de um elétron de condução,  $t$  é o hopping entre vizinhos mais próximos) e o segundo termo é a interação entre os elétrons de condução e os momentos localizados  $\mathbf{S}_i$  via a interação intra-sítio  $J$ , onde  $\sigma$  são matrizes de Pauli.

---

<sup>1</sup>Este modelo pode ser obtido do modelo periódico de Anderson no caso em que temos um elétron  $d$  por sítio e  $|V_{sd}|^2 \ll E_F - \mu$  [49].

Este modelo contém duas escalas de energia: a interação RKKY e a blindagem Kondo. A primeira tende a estabelecer um estado magnético, em geral AF, ordenado de longo alcance<sup>2</sup> e a última um estado não magnético desordenado de líquido de spin<sup>3</sup>. Em uma dimensão um estado de líquido de spin desordenado<sup>4</sup> é estabelecido para qualquer valor da razão  $J/t$ , causando um gap de energia finito nas excitações de carga e spin (sendo o gap de spin sempre menor do que o gap de carga [57]). Em duas e três dimensões não entanto, diversas aproximações [58, 59, 60, 61, 62] sugerem que o estado singlete líquido de spin deve mudar a baixas temperaturas, para um estado ordenado de longo alcance; isto para valores da razão  $J/t$  menores que um valor crítico  $(J/t)_c$ .

Como dissemos anteriormente, existem muitas dificuldades em estudar o modelo KLM em duas e três dimensões, por o que diversas aproximações foram feitas. No que resta do capítulo estudaremos um modelo simplificado do KLM, o chamado *Modelo colar de Kondo* (KNM, do inglês Kondo Necklace model). Utilizaremos uma aproximação de campo médio para transformar o problema em um problema de um corpo e usaremos o formalismo das funções de Green para obter resultados para os parâmetros em campo médio, e assim poder obter os diagramas de fase do modelo.

## 5.1 O Hamiltoniano colar de Kondo

Nesta dissertação estudamos o Hamiltoniano proposto por Doniach em 1977 com objetivo de estudar a relação entre o efeito da blindagem Kondo e a interação

---

<sup>2</sup>Um estado ordenado de longo alcance é aquele no qual spins infinitamente distantes permanecem correlacionados.

<sup>3</sup>Estado que, no limite termodinâmico ( $N \rightarrow \infty$ ), não quebra as simetrias do Hamiltoniano.

<sup>4</sup>O estado ordenado AF desaparece devido ao efeito das flutuações quânticas que aumentam muito em uma dimensão.

RKKY. Doniach propôs um modelo para o Hamiltoniano da rede de Kondo unidimensional, o qual chamou de modelo colar de Kondo. Nesse modelo, a banda de elétrons de condução é substituída por uma cadeia de spins acoplados  $XY$ , a qual suprime flutuações de carga<sup>5</sup> [3] e assim as propriedades críticas só serão descritas por excitações de spin. O modelo é como se segue:

$$\mathcal{H}_{KNM} = t \sum_{\langle i,j \rangle} (\tau_i^x \tau_j^x + \tau_i^y \tau_j^y) + J \sum_i \mathbf{S}_i \cdot \tau_i, \quad (5.2)$$

onde  $t$  são acoplamentos entre spins de primeiros vizinhos,  $\tau$  e  $S$  são operadores de spin-1/2 atuando no sítio  $i$ , os quais são dados pelo  $\sigma^\alpha/2$ ,  $\sigma^\alpha$  são matrizes de Pauli e a notação  $\langle ij \rangle$  representa a soma entre os vizinhos mais próximos. O primeiro termo reproduz elétrons propagando-se e, em uma dimensão, isto pode ser convertido depois de uma transformação Jordan-Wigner em uma banda de férmions sem spin. O segundo termo é a interação magnética entre os spins dos elétrons de condução e os momentos localizados  $\mathbf{S}_i$ , via interação spin-spin AF  $J > 0$  como no Hamiltoniano da rede de Kondo. A figura 5.1 mostra um arranjo esquemático de um colar de Kondo para quatro sítios em uma banda semi-cheia.

Como as características essenciais são mantidas, esperaríamos que as propriedades físicas básicas do modelo rede de Kondo sejam conservadas e a análise dos sistemas de férmions pesados com o modelo KNM seria apropriada [64]. Como os férmions pesados estão próximos de uma instabilidade magnética uma abordagem desta questão em termos de um modelo que considera flutuações de spin é adequada [19]. Assim por exemplo, no trabalho de Rappoport e Continentino [65], obteve-se o diagrama de fase ( $T/W$ ) vs ( $J/W$ ) do modelo colar de Kondo em três dimensões pelo método grupo de renormalização de campo médio. A figura (5.2) apresenta este diagrama que está em excelente acordo com resultados experimentais em compostos de  $Ce$ , como é mostrado na figura (5.3).

---

<sup>5</sup>Isto porque a invariância rotacional do spin no Hamiltoniano da rede de Kondo é destruída.

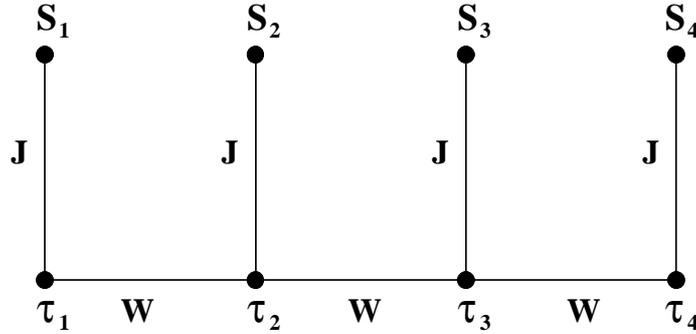


Figura 5.1: Cadeia colar de Kondo para quatro sítios [63].  $\tau$  e  $S$  denotam os spins dos elétrons de condução e dos momentos localizados.  $J$  é o parâmetro de troca AF e  $W$  é a largura da banda de condução. Note-se que, como o KNM é definido com dois spins em cada sítio, a menor representação da célula do sistema está descrita por quatro spins, que como veremos depois são o singlete e os três tripletos.

A maioria das aproximações usadas no modelo do colar de Kondo em uma dimensão como campo médio variacional [3], grupo de renormalização no espaço real [67] e a análise de escala de tamanho finito [68], mostraram a existência de um valor crítico da razão  $(J/t)_c \sim 0.24 - 0.38$ , abaixo do qual um estado AF quase-ordenado de longo alcance<sup>6</sup> aparece, em contraste a  $(J/t)_c = 0$ , o resultado de simulação Monte-Carlo quântico para o KNM [69] e resultados numéricos para o KLM em uma dimensão [70, 71].

Portanto, pode se concluir que existe uma controvérsia a respeito do ordenamento magnético. Note que nosso modelo só toma em conta os spins. Para tratar flutuações de carga precisaríamos do modelo da rede de Anderson. No restante deste capítulo trataremos o Hamiltoniano (5.2) dentro de uma aproximação de campo

<sup>6</sup>Se diz assim quando a função correlação decai a zero de acordo a uma lei de potência; como no modelo de Heisenberg AF unidimensional.

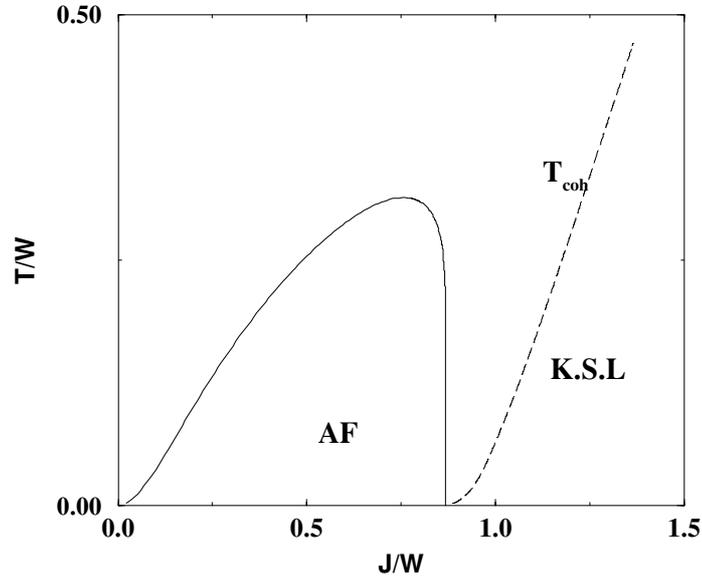


Figura 5.2: Diagrama de fase completo do modelo colar de Kondo em três dimensões obtido pelo método grupo de renormalização de campo médio. A linha tracejada representa a temperatura de coerência e KSL o regime líquido de spin Kondo (KSL, do inglês Kondo spin liquid) [65].

médio, a fim de chegar a uma forma diagonalizável para então podermos usar o método das funções de Green, brevemente descrito no apêndice A.

Nosso ponto de partida é o limite de acoplamento forte  $t/J = 0$ , onde o estado com menor energia do Hamiltoniano (5.2) se reduz a uma soma total das contribuições dos estados singlete Kondo locais independentes em cada sítio da rede. Quando  $t/J \neq 0$ , as interações entre esses estados singlete são consideradas.

Usualmente, para dois spins-1/2  $\tau_i$  e  $\mathbf{S}_i$  localizados em um sítio da rede, o espaço local de Hilbert é representado por quatro estados, um singlete e três tripletos, estes podem ser criados do vácuo como:

$$|s\rangle = s^\dagger|0\rangle, \quad (5.3)$$

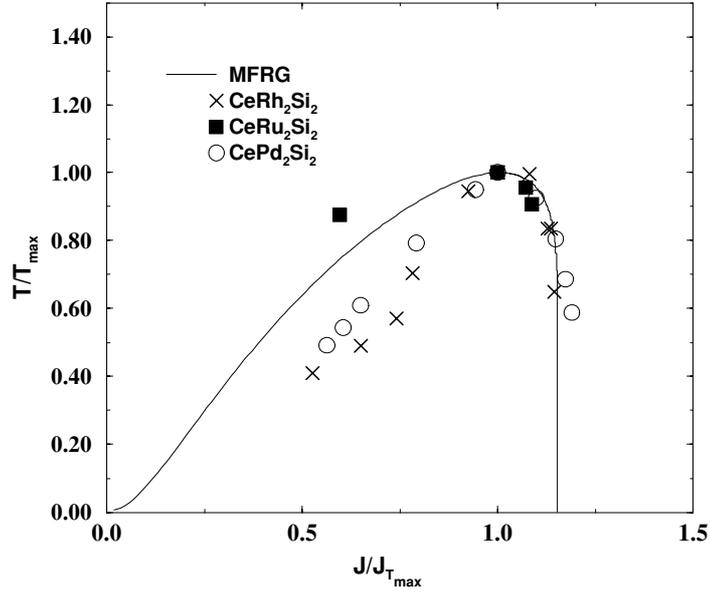


Figura 5.3: Diagrama de fase do modelo colar de Kondo em três dimensões da referência [65] comparado com resultados experimentais para compostos de *Ce* [66].

$$|t_\alpha\rangle = t_\alpha^\dagger |0\rangle \quad (5.4)$$

onde  $|s\rangle$  e  $|t_\alpha\rangle$  são respectivamente os estados que criam o singlete e o tripleto e  $\alpha = x, y, z$ .

A representação dos momentos localizados e do spin dos elétrons de condução em termos dos operadores de enlace (proposta por Sachdev, como foi mostrado no capítulo anterior) singlete e tripleto tem a seguinte forma:

$$S_{n,\alpha} = \frac{1}{2}(s_n^\dagger t_{n,\alpha} + t_{n,\alpha}^\dagger s_n - i\epsilon_{\alpha\beta\gamma} t_{n,\beta}^\dagger t_{n,\gamma}), \quad (5.5)$$

$$\tau_{n,\alpha} = \frac{1}{2}(-s_n^\dagger t_{n,\alpha} - t_{n,\alpha}^\dagger s_n - i\epsilon_{\alpha\beta\gamma} t_{n,\beta}^\dagger t_{n,\gamma}) \quad (5.6)$$

onde  $\alpha, \beta$  e  $\gamma$  representam componentes ao longo dos eixos  $x, y$  e  $z$  respectivamente,  $n$  é um sítio da rede e  $\epsilon$  é o tensor anti-simétrico Levi-Civita. Para restringir o estado físico (singlete ou tripleto), introduzimos a seguinte condição:

$$s_n^\dagger s_n + \sum_{\alpha} t_{n,\alpha}^\dagger t_{n,\alpha} = 1 \quad (5.7)$$

Como no capítulo anterior podemos considerar que estes operadores satisfazem em cada sítio às típicas relações de comutação:

$$[s, s^\dagger] = 1, [t_\alpha, t_\beta^\dagger] = \delta_{\alpha,\beta}, [s, t_\alpha^\dagger] = 0$$

Pode se verificar também que os operadores de spin  $\tau_n$  e  $\mathbf{S}_n$  cumprem às regras de comutação do grupo SU(2) tais como:

$$\begin{aligned} [S_{n,\alpha}, S_{n,\beta}] &= i\epsilon_{\alpha\beta\gamma} S_{n,\gamma}, & [\tau_{n,\alpha}, \tau_{n,\beta}] &= i\epsilon_{\alpha\beta\gamma} \tau_{n,\gamma}, \\ [S_{n,\alpha}, \tau_{n,\beta}] &= 0, & \mathbf{S}_n^2 = \tau_n^2 &= \frac{3}{4}. \end{aligned} \quad (5.8)$$

A álgebra dos operadores singlete e tripleto é usualmente levada em conta com as regras de comutação bosônicas para que se possa obter o significado físico da aproximação campo médio, baseado na idéia da condensação de Bose-Einstein dos estados singlete, isto é  $\langle s \rangle = \langle s^\dagger \rangle \neq 0$ , e  $\langle t \rangle = \langle t^\dagger \rangle = 0$ . Esta teoria de campo médio para bósons foi já usada com sucesso para estudar as propriedades das fase dimerizadas desordenadas em um sistema de muitos spins (spin ladder de spin-1/2 e o modelo de Heisenberg de duas camadas) e será utilizada novamente aqui.

## 5.2 Hamiltoniano de modelo colar de Kondo, na representação dos operadores de Sachdev

Substituindo a nova representação dos operadores de spin para as impurezas e os elétrons de condução (equações (5.5) e (5.6) respectivamente) no Hamiltoniano colar de Kondo (5.2) encontramos:

$$\begin{aligned}
 \mathcal{H}_{KNM} &= \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_1 + \mathcal{H}_2 + \mathcal{H}_3 + \mathcal{H}_4, \\
 \mathcal{H}_0 &= \frac{J}{4} \sum_i (-3s_i^\dagger s_i + \sum_\alpha t_{i,\alpha}^\dagger t_{i,\alpha}), \\
 \mathcal{H}_1 &= \sum_i \mu_i (s_i^\dagger s_i + \sum_\alpha t_{i,\alpha}^\dagger t_{i,\alpha} - 1), \\
 \mathcal{H}_2 &= \frac{t}{4} \sum_{\langle ij \rangle} \left[ s_i^\dagger s_j^\dagger (t_{i,x} t_{j,x} + t_{i,y} t_{j,y}) + s_i^\dagger s_j (t_{i,x} t_{j,x}^\dagger + t_{i,y} t_{j,y}^\dagger) + h.c. \right], \\
 \mathcal{H}_3 &= -\frac{t}{4} \sum_{\langle ij \rangle} \left[ t_{i,z}^\dagger t_{j,z}^\dagger (t_{i,x} t_{j,x} + t_{i,y} t_{j,y}) - t_{i,z}^\dagger t_{j,z} (t_{i,x} t_{j,x}^\dagger + t_{i,y} t_{j,y}^\dagger) + h.c. \right], \\
 \mathcal{H}_4 &= \frac{it}{4} \sum_{\langle ij \rangle} \sum_{\alpha,\beta,\gamma} \epsilon_{\alpha\beta\gamma} \left[ s_i^\dagger t_{i,\alpha} t_{j,\beta}^\dagger t_{j,\gamma} + s_j^\dagger t_{j,\alpha} t_{i,\beta}^\dagger t_{i,\gamma} + h.c. \right], \tag{5.9}
 \end{aligned}$$

onde  $\mathcal{H}_0$  representa a interação entre os spins  $\mathbf{S}$  e  $\tau$  no sítio  $i$ ,  $\mathcal{H}_1$  introduz a condição de estado físico possível e  $\mathcal{H}_2$ ,  $\mathcal{H}_3$  e  $\mathcal{H}_4$  são os termos introduzidos pelo hopping. O potencial químico  $\mu_i$ , dependente do sítio, foi introduzido para impor a restrição local (condição de única ocupação). Como vimos na seção anterior, estamos considerando um spin-1 local este pode ser representado por três bósons  $t_\alpha$  com ( $\alpha = x, y, z$ ) dois transversais ( $t_x$  e  $t_y$ ) e uma longitudinal ( $t_z$ ) assim:

$$t_\alpha = \begin{cases} t_x & \text{se } m_s = 1, \text{ (de autoestado } s_z = 1) \\ t_y & \text{se } m_s = -1, \text{ (de autoestado } s_z = -1) \\ t_z & \text{se } m_s = 0, \text{ (de autoestado } s_z = 0) \end{cases} \tag{5.10}$$

onde  $m_s$  é o parâmetro de ordem AF magnetização “staggered” e os autovalores cumprem a relação  $\langle s_z \rangle = 0$ . Esta propriedade preservará o desordem do estado fundamental.

Finalmente  $\mathcal{H}_2$  descreve o acoplamento entre o estado singlete e o estado tripleto transversal.  $\mathcal{H}_3$  representa o acoplamento entre os estados tripleto, transversal e longitudinal, e  $\mathcal{H}_4$  descreve a interação entre um bóson singlete e as três diferentes componentes de um bóson tripleto.

## 5.3 Aproximação de Campo Médio

O Hamiltoniano (5.9), como já foi dito pode ser resolvido com uma aproximação de campo médio que desacople seus termos quárticos, considerando:

$$\langle s_i^\dagger \rangle = \langle s_i \rangle = \bar{s} \quad (5.11)$$

a qual corresponde a uma condensação de Bose-Einstein do estado singlete Kondo local em cada sítio, em concordância com a configuração do estado fundamental no limite de acoplamento forte  $t/J = 0$ . Como a simetria translacional do problema é invariante isso implica que devemos assumir  $\mu_i = \mu$ .

### 5.3.1 Fase ordenada Antiferromagnética

Visando descrever a fase ordenada magnética, consideraremos também a condensação do operador tripleto (bósons  $t_{\mathbf{k},x}$ ) da forma,

$$t_{\mathbf{k},x} = \sqrt{N\bar{t}}\delta_{\mathbf{k},\mathbf{Q}} + \eta_{\mathbf{k},x} \quad (5.12)$$

que corresponde a fixar a orientação dos spins localizados no eixo- $x$ . Portanto, tem-se a seguinte condição:

$$t_{\mathbf{k},x} = \begin{cases} \eta_{\mathbf{k},x} & \text{se } \mathbf{k} \neq \mathbf{Q} \\ \sqrt{N\bar{t}} + \eta_{\mathbf{k},x} & \text{se } \mathbf{k} = \mathbf{Q} \end{cases}, \quad (5.13)$$

onde  $\mathbf{Q}$  é o momentum associado com a fase AF definido como  $\mathbf{Q}_{AF} = (\pi/a, \pi/a, \pi/a)$  em três dimensões,  $a$  é o parâmetro de rede e  $\bar{t}$  é o parâmetro de ordem tripleto.

## 5.4 Hamiltoniano colar de Kondo na aproximação de Campo Médio

Com a aproximação de campo médio, a inclusão de  $\mathcal{H}_3$  não afeta muito o resultado final, e todos os termos de  $\mathcal{H}_4$  desaparecem identicamente na presente aproximação devido à simetria de reflexão<sup>7</sup>, então só consideraremos os termos  $\mathcal{H}_0$  e  $\mathcal{H}_1$ .

Finalmente levando o Hamiltoniano colar de Kondo em uma representação de estados de Bloch (lembre que este Hamiltoniano está escrito em função dos sítios, é dizer tem uma representação em Wannier). Para isso introduzimos as transformadas de Fourier:

$$\begin{aligned} t_{i,\alpha} &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} t_{\mathbf{k},\alpha} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_i} \\ t_{i,\alpha}^\dagger &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} t_{\mathbf{k},\alpha}^\dagger e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_i}. \end{aligned} \quad (5.14)$$

onde  $N$  é o número de sítios de uma rede hiper-cúbica e  $\mathbf{k}$  seu vetor de onda.

Com isso obtemos o seguinte Hamiltoniano efetivo para o modelo colar de Kondo no espaço de momentos em função dos operadores de enlace singleto e tripleto:

---

<sup>7</sup>O arranjo dos spins na banda semi-cheia possui um plano perpendicular de reflexão ao comprimento entre os spins locais e que passa pelo centro deste. Os termos que contem operadores tripleto  $t$  trocam seu sinal devido a esta reflexão e assim não são levados em conta ao encontrar o  $\mathcal{H}_{mf}$ .

$$\begin{aligned}
 \mathcal{H}_{mf} = & N \left[ -\frac{3}{4}J\bar{s}^2 + \mu\bar{s}^2 - \mu + \left( \frac{J}{4} + \mu + t\bar{s}^2\lambda(\mathbf{k}) \right) \bar{t}^2 \right] \\
 & + \sum_{\mathbf{k}} \left[ \Lambda_{\mathbf{k}}\eta_{\mathbf{k},x}^\dagger\eta_{\mathbf{k},x} + \Delta_{\mathbf{k}} \left( \eta_{\mathbf{k},x}^\dagger\eta_{-\mathbf{k},x}^\dagger + \eta_{\mathbf{k},x}\eta_{-\mathbf{k},x} \right) \right] \\
 & + \sum_{\mathbf{k}} \left[ \Lambda_{\mathbf{k}}t_{\mathbf{k},y}^\dagger t_{\mathbf{k},y} + \Delta_{\mathbf{k}} \left( t_{\mathbf{k},y}^\dagger t_{-\mathbf{k},y}^\dagger + t_{\mathbf{k},y}t_{-\mathbf{k},y} \right) \right] \\
 & + \sum_{\mathbf{k}} \left[ \Lambda_{\mathbf{k}}(\eta_{\mathbf{k},x}^\dagger + \eta_{\mathbf{k},x}) + \Delta_{\mathbf{k}} \left( \eta_{\mathbf{k},x}^\dagger + \eta_{-\mathbf{k},x}^\dagger + \eta_{\mathbf{k},x} + \eta_{-\mathbf{k},x} \right) \right] \\
 & + \left( \frac{J}{4} + \mu \right) \sum_{\mathbf{k}} t_{\mathbf{k},z}^\dagger t_{\mathbf{k},z}, \tag{5.15}
 \end{aligned}$$

onde,

$$\begin{aligned}
 \Lambda_{\mathbf{k}} &= \left( \frac{J}{4} + \mu \right) + \frac{1}{2}t\bar{s}^2\lambda(\mathbf{k}), \\
 \Delta_{\mathbf{k}} &= \frac{1}{4}t\bar{s}^2\lambda(\mathbf{k}), \\
 \lambda(\mathbf{k}) &= \sum_{a=1}^d \cos k_a \tag{5.16}
 \end{aligned}$$

sendo  $d$  a dimensão espacial e tomamos o parâmetro de rede  $a = 1$ .

O Hamiltoniano (5.15) pode ser diagonalizado usando as equações de movimento para as funções de Green convenientes (ver apêndice A) e assim obter os espectros de excitação do sistema como também a energia livre a temperatura finita. Por conseguinte, temos em primeiro lugar que encontrar a média estatística dos respectivos pares de operadores como:

$$\begin{aligned}
 \langle \mathcal{H}_{mf} \rangle = & N \left[ -\frac{3}{4}J\bar{s}^2 + \mu\bar{s}^2 - \mu + \left( \frac{J}{4} + \mu + t\bar{s}^2\lambda(\mathbf{k}) \right) \bar{t}^2 \right] \\
 & + \sum_{\mathbf{k}} \left[ \Lambda_{\mathbf{k}}\langle \eta_{\mathbf{k},x}^\dagger\eta_{\mathbf{k},x} \rangle + \Delta_{\mathbf{k}} \left( \langle \eta_{\mathbf{k},x}^\dagger\eta_{-\mathbf{k},x}^\dagger \rangle + \langle \eta_{\mathbf{k},x}\eta_{-\mathbf{k},x} \rangle \right) \right] \\
 & + \sum_{\mathbf{k}} \left[ \Lambda_{\mathbf{k}}\langle t_{\mathbf{k},y}^\dagger t_{\mathbf{k},y} \rangle + \Delta_{\mathbf{k}} \left( \langle t_{\mathbf{k},y}^\dagger t_{-\mathbf{k},y}^\dagger \rangle + \langle t_{\mathbf{k},y}t_{-\mathbf{k},y} \rangle \right) \right] \\
 & + \left( \frac{J}{4} + \mu \right) \sum_{\mathbf{k}} \langle t_{\mathbf{k},z}^\dagger t_{\mathbf{k},z} \rangle. \tag{5.17}
 \end{aligned}$$

onde, considerou-se  $\langle \eta_{\mathbf{k},x}^\dagger \rangle = \langle \eta_{\mathbf{k},x} \rangle = \langle \eta_{-\mathbf{k},x}^\dagger \rangle = \langle \eta_{-\mathbf{k},x} \rangle = 0$  por não terem significado físico nenhum.

## 5.5 Equações de movimento do sistema

Para calcular as médias estatísticas  $\langle t_{\mathbf{k},z}^\dagger t_{\mathbf{k},z} \rangle$ ,  $\langle t_{\mathbf{k},y}^\dagger t_{\mathbf{k},y} \rangle$ ,  $\langle t_{\mathbf{k},y}^\dagger t_{-\mathbf{k},y}^\dagger \rangle$ ,  $\langle t_{\mathbf{k},y} t_{-\mathbf{k},y} \rangle$ ,  $\langle \eta_{\mathbf{k},x}^\dagger \eta_{\mathbf{k},x} \rangle$ ,  $\langle \eta_{\mathbf{k},x}^\dagger \eta_{-\mathbf{k},x}^\dagger \rangle$  e  $\langle \eta_{\mathbf{k},x} \eta_{-\mathbf{k},x} \rangle$  temos que construir um sistema fechado com as equações de movimento dos propagadores  $\ll t_{\mathbf{k}z}; t_{\mathbf{k}'z}^\dagger \gg$ ,  $\ll \eta_{\mathbf{k}x}; \eta_{\mathbf{k}'x}^\dagger \gg$ ,  $\ll \eta_{-\mathbf{k}x}^\dagger; \eta_{\mathbf{k}'x}^\dagger \gg$ ,  $\ll \eta_{-\mathbf{k}x}; \eta_{\mathbf{k}'x} \gg$ ,  $\ll t_{\mathbf{k}y}; t_{\mathbf{k}'y}^\dagger \gg$ ,  $\ll t_{-\mathbf{k}y}^\dagger; t_{\mathbf{k}'y}^\dagger \gg$  e  $\ll t_{-\mathbf{k}y}; t_{\mathbf{k}'y} \gg$ . Para esse motivo usamos a expressão geral da equação de movimento das funções de Green indicada por:

$$\omega \ll A; B \gg_\omega = \frac{1}{2\pi} \langle [A, B] \rangle + \ll [A, H]; B \gg$$

com isso obtemos,

$$\begin{aligned} \omega \ll t_{\mathbf{k}z}; t_{\mathbf{k}'z}^\dagger \gg_\omega &= \frac{1}{2\pi} \langle [t_{\mathbf{k}z}, t_{\mathbf{k}'z}^\dagger] \rangle + \ll [t_{\mathbf{k}z}, \mathcal{H}_{mf}]; t_{\mathbf{k}'z}^\dagger \gg, \\ \omega \ll \eta_{\mathbf{k}x}; \eta_{\mathbf{k}'x}^\dagger \gg_\omega &= \frac{1}{2\pi} \langle [\eta_{\mathbf{k}x}, \eta_{\mathbf{k}'x}^\dagger] \rangle + \ll [\eta_{\mathbf{k}x}, \mathcal{H}_{mf}]; \eta_{\mathbf{k}'x}^\dagger \gg, \\ \omega \ll \eta_{-\mathbf{k}x}^\dagger; \eta_{\mathbf{k}'x}^\dagger \gg_\omega &= \frac{1}{2\pi} \langle [\eta_{-\mathbf{k}x}^\dagger, \eta_{\mathbf{k}'x}^\dagger] \rangle + \ll [\eta_{-\mathbf{k}x}^\dagger, \mathcal{H}_{mf}]; \eta_{\mathbf{k}'x}^\dagger \gg, \\ \omega \ll \eta_{-\mathbf{k}x}; \eta_{\mathbf{k}'x} \gg_\omega &= \frac{1}{2\pi} \langle [\eta_{-\mathbf{k}x}, \eta_{\mathbf{k}'x}] \rangle + \ll [\eta_{-\mathbf{k}x}, \mathcal{H}_{mf}]; \eta_{\mathbf{k}'x} \gg, \\ \omega \ll t_{\mathbf{k}y}; t_{\mathbf{k}'y}^\dagger \gg_\omega &= \frac{1}{2\pi} \langle [t_{\mathbf{k}y}, t_{\mathbf{k}'y}^\dagger] \rangle + \ll [t_{\mathbf{k}y}, \mathcal{H}_{mf}]; t_{\mathbf{k}'y}^\dagger \gg, \\ \omega \ll t_{-\mathbf{k}y}^\dagger; t_{\mathbf{k}'y}^\dagger \gg_\omega &= \frac{1}{2\pi} \langle [t_{-\mathbf{k}y}^\dagger, t_{\mathbf{k}'y}^\dagger] \rangle + \ll [t_{-\mathbf{k}y}^\dagger, \mathcal{H}_{mf}]; t_{\mathbf{k}'y}^\dagger \gg, \\ \omega \ll t_{-\mathbf{k}y}; t_{\mathbf{k}'y} \gg_\omega &= \frac{1}{2\pi} \langle [t_{-\mathbf{k}y}, t_{\mathbf{k}'y}] \rangle + \ll [t_{-\mathbf{k}y}, \mathcal{H}_{mf}]; t_{\mathbf{k}'y} \gg. \end{aligned} \quad (5.18)$$

Resolvendo este sistemas de equações, obtemos os seguintes propagadores de interesse:

$$\begin{aligned}
 \langle\langle \eta_{\mathbf{k}x}; \eta_{\mathbf{k}x}^\dagger \rangle\rangle &= \frac{1}{4\pi} \left[ \left(1 + \frac{\Lambda_{\mathbf{k}}}{\omega_{\mathbf{k}}}\right) \frac{1}{\omega - \omega_{\mathbf{k}}} + \left(1 - \frac{\Lambda_{\mathbf{k}}}{\omega_{\mathbf{k}}}\right) \frac{1}{\omega + \omega_{\mathbf{k}}} \right], \\
 \langle\langle \eta_{-\mathbf{k}x}^\dagger; \eta_{\mathbf{k}'x}^\dagger \rangle\rangle &= \frac{\Delta_{\mathbf{k}}}{2\pi\omega_{\mathbf{k}}} \left[ \frac{1}{\omega + \omega_{\mathbf{k}}} - \frac{1}{\omega - \omega_{\mathbf{k}}} \right], \\
 \langle\langle \eta_{-\mathbf{k}x}; \eta_{\mathbf{k}'x} \rangle\rangle &= \frac{\Delta_{\mathbf{k}}}{2\pi\omega_{\mathbf{k}}} \left[ \frac{1}{\omega + \omega_{\mathbf{k}}} - \frac{1}{\omega - \omega_{\mathbf{k}}} \right], \\
 \langle\langle t_{\mathbf{k}y}; t_{\mathbf{k}y}^\dagger \rangle\rangle &= \frac{1}{4\pi} \left[ \left(1 + \frac{\Lambda_{\mathbf{k}}}{\omega_{\mathbf{k}}}\right) \frac{1}{\omega - \omega_{\mathbf{k}}} + \left(1 - \frac{\Lambda_{\mathbf{k}}}{\omega_{\mathbf{k}}}\right) \frac{1}{\omega + \omega_{\mathbf{k}}} \right], \\
 \langle\langle t_{-\mathbf{k}y}^\dagger; t_{\mathbf{k}'y}^\dagger \rangle\rangle &= \frac{\Delta_{\mathbf{k}}}{2\pi\omega_{\mathbf{k}}} \left[ \frac{1}{\omega + \omega_{\mathbf{k}}} - \frac{1}{\omega - \omega_{\mathbf{k}}} \right], \\
 \langle\langle t_{-\mathbf{k}y}; t_{\mathbf{k}'y} \rangle\rangle &= \frac{\Delta_{\mathbf{k}}}{2\pi\omega_{\mathbf{k}}} \left[ \frac{1}{\omega + \omega_{\mathbf{k}}} - \frac{1}{\omega - \omega_{\mathbf{k}}} \right], \\
 \langle\langle t_{\mathbf{k}z}; t_{\mathbf{k}z}^\dagger \rangle\rangle &= \frac{1}{2\pi} \frac{1}{\omega - \omega_0}
 \end{aligned} \tag{5.19}$$

onde,

$$\omega_0 = \left( \frac{J}{4} + \mu \right) \tag{5.20}$$

$$\omega_{\mathbf{k}} = \sqrt{\Lambda_{\mathbf{k}}^2 - (2\Delta_{\mathbf{k}})^2} \tag{5.21}$$

As excitações dos sistemas são obtidas dos polos dos propagadores acima, sendo que  $\omega_0$  é o espectro da excitação do estado tripleto longitudinal  $t_z$  e,  $\omega_{\mathbf{k}}$  o espectro de excitação dos estados tripleto transversais  $t_x$  e  $t_y$ .

### 5.5.1 Cálculo dos valores médios

Os valores médios que precisamos para achar as equações de movimento de nosso sistema são calculados aplicando-se o teorema do salto, de forma que

$$\langle AB \rangle = F_\omega[\langle\langle B; A \rangle\rangle_\omega]$$

onde  $F_\omega$  é definido por

$$F_\omega[\ll B; A \gg_\omega] = \lim_{\eta \rightarrow 0} 2\pi i \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega f(\omega) [\ll B; A \gg_{\omega+i\eta} - \ll B; A \gg_{\omega-i\eta}]$$

sendo  $f(\omega)$  a função de Bose-Einstein<sup>8</sup>  $f(\omega) = \frac{1}{e^{\beta\omega} - 1}$  e  $\beta = \frac{1}{k_B T}$ . Então, usando a expressão acima e considerando a propriedade da função  $\delta$  delta de Dirac,

$$\lim_{\eta \rightarrow 0} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{f(x)}{x - x_0 \pm i\eta} dx = P \int_{-\infty}^{\infty} \frac{f(x)}{x - x_0} dx \mp \int_{-\infty}^{\infty} f(x) \delta(x - x_0) dx \quad (5.22)$$

Chegamos aos seguintes valores médios:

$$\begin{aligned} \langle \eta_{\mathbf{k},x}^\dagger \eta_{\mathbf{k},x} \rangle &= \frac{1}{2} \left[ \left(1 + \frac{\Lambda_{\mathbf{k}}}{\omega_{\mathbf{k}}}\right) f(\omega_{\mathbf{k}}) + \left(1 - \frac{\Lambda_{\mathbf{k}}}{\omega_{\mathbf{k}}}\right) f(-\omega_{\mathbf{k}}) \right] \\ \langle \eta_{\mathbf{k},x}^\dagger \eta_{-\mathbf{k},x}^\dagger \rangle &= \frac{\Delta_{\mathbf{k}}}{\omega_{\mathbf{k}}} [f(-\omega_{\mathbf{k}}) - f(\omega_{\mathbf{k}})] \\ \langle \eta_{\mathbf{k},x} \eta_{-\mathbf{k},x} \rangle &= \frac{\Delta_{\mathbf{k}}}{\omega_{\mathbf{k}}} [f(-\omega_{\mathbf{k}}) - f(\omega_{\mathbf{k}})] \\ \langle t_{\mathbf{k},y}^\dagger t_{\mathbf{k},y} \rangle &= \frac{1}{2} \left[ \left(1 + \frac{\Lambda_{\mathbf{k}}}{\omega_{\mathbf{k}}}\right) f(\omega_{\mathbf{k}}) + \left(1 - \frac{\Lambda_{\mathbf{k}}}{\omega_{\mathbf{k}}}\right) f(-\omega_{\mathbf{k}}) \right] \\ \langle t_{\mathbf{k},y}^\dagger t_{\mathbf{k},y} \rangle &= \frac{1}{2} \left[ \left(1 + \frac{\Lambda_{\mathbf{k}}}{\omega_{\mathbf{k}}}\right) f(\omega_{\mathbf{k}}) + \left(1 - \frac{\Lambda_{\mathbf{k}}}{\omega_{\mathbf{k}}}\right) f(-\omega_{\mathbf{k}}) \right] \\ \langle t_{\mathbf{k},y}^\dagger t_{-\mathbf{k},y}^\dagger \rangle &= \frac{1}{2} \left[ \left(1 + \frac{\Lambda_{\mathbf{k}}}{\omega_{\mathbf{k}}}\right) f(\omega_{\mathbf{k}}) + \left(1 - \frac{\Lambda_{\mathbf{k}}}{\omega_{\mathbf{k}}}\right) f(-\omega_{\mathbf{k}}) \right] \\ \langle t_{\mathbf{k},z}^\dagger t_{\mathbf{k},z} \rangle &= f(\omega_0). \end{aligned} \quad (5.23)$$

como já foi mencionado:

$$f(\omega_{\mathbf{k}}) = \frac{1}{e^{\beta\omega_{\mathbf{k}}} - 1},$$

onde,  $\beta = 1/k_B T$ ,  $k_B$  a constante de Boltzman,  $T$  a temperatura finita.

---

<sup>8</sup>O potencial químico é zero devido à condensação de Bose-Einstein.

## 5.6 Energia livre do modelo colar de Kondo a temperatura finita

Considerando agora a nova representação

$$\begin{aligned} f(\omega_{\mathbf{k}}) &= \frac{1}{e^{\beta\omega_{\mathbf{k}}} - 1} = \frac{1}{2} \left( \coth \frac{\beta\omega_{\mathbf{k}}}{2} - 1 \right), \\ f(\omega_0) &= \frac{1}{e^{\beta\omega_0} - 1} = \frac{1}{2} \left( \coth \frac{\beta\omega_0}{2} - 1 \right), \end{aligned} \quad (5.24)$$

obtemos a expressão para energia livre do modelo colar de Kondo a temperatura finita:

$$\varepsilon = \langle \mathcal{H}_{mf} \rangle = \varepsilon' + \frac{\omega_0}{2} \sum_{\mathbf{k}} \left( \coth \frac{\omega_0}{2k_B T} - 1 \right) + \sum_{\mathbf{k}} \left( \omega_{\mathbf{k}} \coth \frac{\omega_{\mathbf{k}}}{2k_B T} - \Lambda_0 \right) \quad (5.25)$$

e

$$\varepsilon' = N \left[ -\frac{3}{4} J \bar{s}^2 + \mu \bar{s}^2 - \mu + \left( \frac{J}{4} + \mu + t \bar{s}^2 \lambda(\mathbf{k}) \right) \bar{t}^2 \right] \quad (5.26)$$

onde  $\omega_0 = \left( \frac{J}{4} + \mu \right)$  é o nível de energia do estado tripleto longitudinal sem dispersão,  $\omega_{\mathbf{k}} = \sqrt{\Lambda_{\mathbf{k}}^2 - (2\Delta_{\mathbf{k}})^2}$  corresponde ao nível de energia do estado tripleto transversal.

### 5.6.1 Energia livre do modelo colar de Kondo no estado fundamental

As excitações das quase-partículas que surgem do estado tripleto formam uma banda, esta banda é mínima quando  $k = Q = \pi$  (vetor recíproco AF), desse modo  $\lambda(\mathbf{k})$  tem um valor definido como:

$$\lambda(k = Q) = -\frac{Z}{2}$$

onde  $Z$  é o número de coordenação (número total de vizinhos mais próximos) na rede hiper-cúbica.

Assim, a temperatura zero a expressão (5.25) nos oferece a energia livre do sistema KNM no estado fundamental:

$$\varepsilon'_g = N \left[ -\frac{3}{4} J \bar{s}^2 + \mu \bar{s}^2 - \mu + \left( \frac{J}{4} + \mu - \frac{1}{2} Z t \bar{s}^2 \right) \bar{t}^2 \right] + \sum_{\mathbf{k}} (\omega_{\mathbf{k}} - \Lambda_{\mathbf{k}}), \quad (5.27)$$

onde os parâmetros de ordem  $\bar{s}$  e  $\bar{t}$  neste caso ( $T = 0$ ) definem o estado fundamental do Hamiltoniano colar de Kondo,

Quando  $\bar{s} \neq 0, \bar{t} = 0 \rightarrow$  fase singleto tipo Kondo.

Quando  $\bar{s} \neq 0, \bar{t} \neq 0 \rightarrow$  fase antiferromagnética. (5.28)

Como o novo parâmetro de ordem  $\bar{t}$  é diferente de zero, sua equação de ponto de sela  $\partial\varepsilon/\partial\bar{t} = 0$  nos fornece:

$$\mu = \frac{1}{2} Z t \bar{s}^2 - \frac{J}{4} \quad (5.29)$$

o qual elimina o gap e nos apresenta uma nova expressão para o espectro de excitação do estado tripleto transversal da forma:

$$\begin{aligned} \omega_{\mathbf{k}} &= \sqrt{\Lambda_{\mathbf{k}}^2 - (2\Delta_{\mathbf{k}})^2} \\ &= \sqrt{\omega_0 [\omega_0 + t \bar{s}^2 \lambda(\mathbf{k})]} \end{aligned} \quad (5.30)$$

do qual, considerando (5.29), se obtêm a nova representação do espectro de excitação do estado tripleto transversal na fase ordenada antiferromagnética,

$$\omega_{\mathbf{k}} = \frac{1}{2} Z t \bar{s}^2 \sqrt{1 + \frac{2\lambda(\mathbf{k})}{Z}} \quad (5.31)$$

Desse modo, o estado fundamental corresponde a um estado magnético ordenado de longo alcance caracterizado por um vetor de onda  $\mathbf{q} = \mathbf{Q}$  e parâmetro de ordem AF  $m_s$ .

Neste caso, a formação de um estado ordenado AF de longo alcance no modelo colar de Kondo ou no modelo da rede de Kondo é possível. Quando  $t/J$  é pequeno (acoplamento forte) a blindagem dos momentos localizados é total, então o estado fundamental será um produto de estados singlete locais independentes [71]. Quando  $t/J$  começa a crescer, os spins dos elétrons de condução têm mais possibilidade de se propagarem pelos sítios próximos e a blindagem dos momentos localizados é só parcial ( $\bar{s} \neq 0$ ), assim a parte restante dos momentos localizados nos diferentes sítios da rede começa a desenvolver correlações de longo alcance ( $\bar{t} \neq 0$ ) mediadas pelos spins dos elétrons de condução [4]. Esse estado fundamental magnético ordenado de longo alcance é próprio de alguns férmions pesados baseados em Urânio, Cério e de Yterbio.

## 5.7 Diagrama de Fase do modelo colar de Kondo no estado fundamental

Visando determinar os parâmetros  $\bar{s}$  e  $\bar{t}$  minimizamos a energia do estado fundamental dada pela equação (5.27) achando as equações de ponte de sela,

$$\left( \frac{\partial \varepsilon'_g}{\partial \mu}, \frac{\partial \varepsilon'_g}{\partial \bar{s}} \right) = (0, 0)$$

chegamos às expressões para os parâmetros de ordem singlete e tripleto respectivamente,

$$\begin{aligned}\bar{s}^2 &= 1 + \frac{J}{Zt} - \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{k}} \sqrt{1 + 2\lambda(\mathbf{k})/Z}, \\ \bar{t}^2 &= 1 - \frac{J}{Zt} - \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{\sqrt{1 + 2\lambda(\mathbf{k})/Z}}.\end{aligned}\quad (5.32)$$

Vale notar que o parâmetro de ordem tripleto pode se escrever como,

$$\bar{t}^2 = \left( \frac{J}{Zt} \right)_c - \frac{J}{Zt}$$

onde  $(J/Zt)_c = 1 - \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{\sqrt{1+2\lambda(\mathbf{k})/Z}}$ . Logo sabendo que  $g = |(J/t)_c - (J/t)|$  obtemos finalmente,

$$\bar{t}^2 = \frac{g}{Z} \quad (5.33)$$

onde  $g$  define a distância ao ponto crítico quântico. Portanto demonstramos que a descoberta do ponto crítico será feita quando  $\bar{t} = 0$ .

Finalmente pode notar-se que os parâmetros  $\bar{s}$  e  $\bar{t}$  só dependem do número de coordenação  $Z$  e de  $\lambda(\mathbf{k}) = \sum_{\mathbf{a}=1}^d \cos \mathbf{k}_a$ , assim podem ser calculadas para qualquer dimensão  $d$ . Já na referência elas são avaliadas para duas e três dimensões considerando que o parâmetro de ordem AF é definido como  $m_s = \frac{1}{2} \langle \tau^x - S^x \rangle = \sqrt{\bar{s}^2 \bar{t}^2} = \bar{s} \bar{t}$ . Esboçaremos aqui os diagramas de fase da referência para essas dimensões.

### 5.7.1 Em duas dimensões

Em duas dimensões o número de coordenação é  $Z = 4$ , assim efetuando as somas da expressão (5.32) e fazendo o produto dos parâmetros  $\bar{s}$  e  $\bar{t}$  encontramos que,

$$m_s = \sqrt{\left(0.35712 - \frac{J}{4t}\right)\left(0.52095 + \frac{J}{4t}\right)}.$$

onde a soma foi feita sobre todos os  $k$ . Esta expressão mostra a existência de um valor crítico da razão  $J/t$  dado por  $(J/4t)_c \approx 0.35712$  onde o parâmetro de ordem da fase AF se anula. Note que próximo do ponto crítico quântico (QCP) em  $T = 0$ ,  $(J/t) = (J/t)_c$  temos  $m_s \propto [(J/t)_c - (J/t)]^{1/2}$ . Portanto se anula com o expoente crítico de campo médio  $\beta = 1/2$ . A figura (5.4) mostra esta linha crítica de Neel que sai do valor crítico  $(t/J)_c \approx 0.7$ .

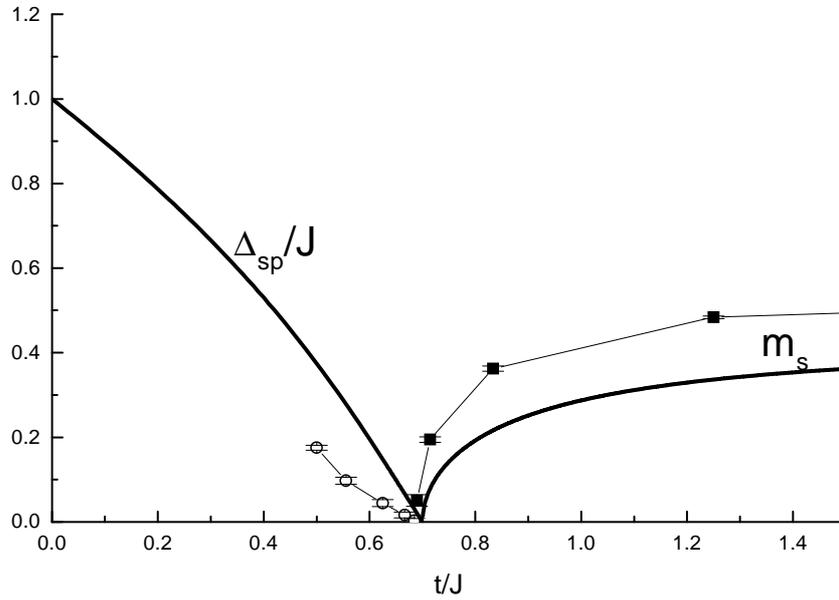


Figura 5.4: Gráfico do momento magnético “staggered” e do gap de spin para o KNM em duas dimensões a temperatura zero comparado com resultados por simulação Monte-Carlo [60]. A linha  $m_s$  sai de um valor crítico  $(t/J)_c \approx 0.7$ . Figura reproduzida da referência [53].

### 5.7.2 Em três dimensões

Agora  $Z = 6$  e somando sobre todos os  $k$  obtemos:

$$m_s = \sqrt{\left(0.44234 - \frac{J}{6t}\right)\left(0.51263 + \frac{J}{6t}\right)}.$$

Esta expressão mostra a existência de um valor crítico da razão  $J/t$  dado por  $(J/6t)_c \approx 0.44234$  onde o parâmetro de ordem da fase AF se anula com expoente crítico de campo médio  $\beta = 1/2$ . A figura (5.5) esboça a linha  $m_s$  saindo de um valor crítico  $(t/J)_c \approx 0.38$ .

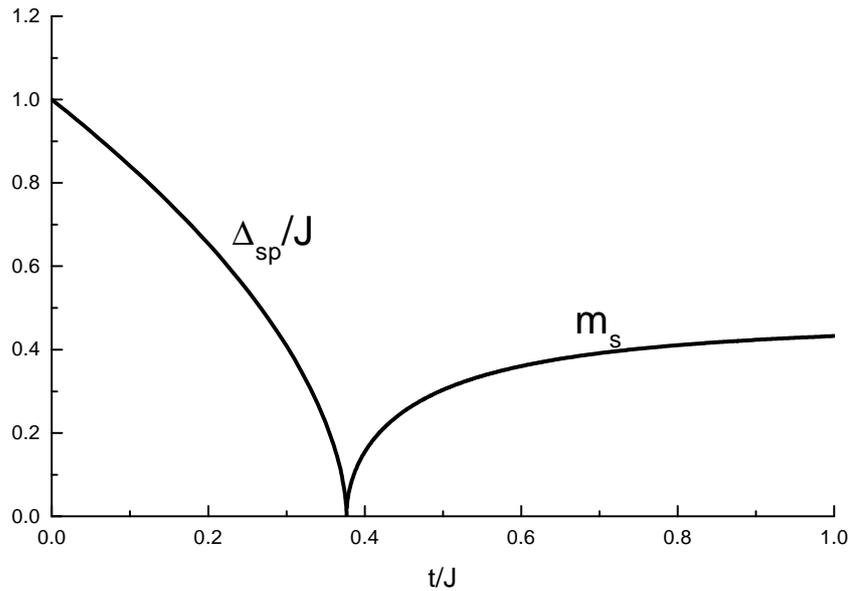


Figura 5.5: Gráfico do gap de spin e do momento magnético “staggered” para o KNM em três dimensões a temperatura zero. A linha  $m_s$  sai de um valor crítico  $(t/J)_c \approx 0.38$ . Figura reproduzida da referência [53].

No que resta da dissertação levaremos em conta a temperatura, esta como parâmetro de controle para a caracterização do modelo colar de Kondo no diagrama  $T$  vs  $J/t$  em dimensões  $d \geq 3$ .

## 5.8 Parâmetros de ordem singleto e tripleto a temperatura finita

Visando estudar agora o modelo colar de Kondo a temperatura finita, precisamos obter os parâmetros de ordem singleto  $\bar{s}$  e tripleto  $\bar{t}$  em função da temperatura. O primeiro passo é minimizar a expressão da energia livre (5.25) usando as equações de ponto de sela

$$\left( \frac{\partial \varepsilon}{\partial \mu}, \frac{\partial \varepsilon}{\partial \bar{s}} \right) = (0, 0)$$

com isso obtemos que a temperatura finita [73] os parâmetros de ordem singleto e tripleto são dados por:

$$\bar{s}^2 = 1 + \frac{J}{Zt} - \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{k}} \sqrt{1 + \frac{2\lambda(\mathbf{k})}{Z}} \coth \frac{\omega_{\mathbf{k}}}{2k_B T} + \frac{1}{4Nk_B T} \sum_{\mathbf{k}} \sqrt{1 + \frac{2\lambda(\mathbf{k})}{Z}} \frac{\omega_{\mathbf{k}}}{\sinh^2 \frac{\omega_{\mathbf{k}}}{2k_B T}} + \xi, \quad (5.34)$$

$$\bar{t}^2 = 1 - \frac{J}{Zt} - \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{\sqrt{1 + \frac{2\lambda(\mathbf{k})}{Z}}} \coth \frac{\omega_{\mathbf{k}}}{2k_B T} + \frac{1}{4Nk_B T} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{\sqrt{1 + \frac{2\lambda(\mathbf{k})}{Z}}} \frac{\omega_{\mathbf{k}}}{\sinh^2 \frac{\omega_{\mathbf{k}}}{2k_B T}} + \xi, \quad (5.35)$$

onde

$$\xi = -\frac{1}{4N} \sum_{\mathbf{k}} \left( \coth \frac{\omega_0}{2k_B T} - 1 \right) + \frac{\omega_0}{8Nk_B T} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{\sinh^2 \frac{\omega_0}{2k_B T}}. \quad (5.36)$$

Note-se das equações acima a dependência dos parâmetros de ordem  $\bar{s}$  e  $\bar{t}$  com a soma em  $\mathbf{k}$ , estas serão realizadas nas próximas seções considerando o limite termodinâmico ( $N \rightarrow \infty$ ) a fim de transformar a soma em uma integral considerando  $\mathbf{k} \rightarrow 0$ .

### 5.8.1 Aproximação a baixas temperaturas

O segundo passo é agora fazer uma aproximação conveniente que possa representar temperaturas muito próximas da transição de fase quântica. Assim podemos considerar:

$$\begin{aligned} \coth \frac{\omega_{\mathbf{k}}}{2k_B T} &\approx 1 - 2e^{-\frac{\omega_{\mathbf{k}}}{k_B T}} + \dots \\ \frac{1}{\sinh \frac{\omega_{\mathbf{k}}}{2k_B T}} &\approx 4e^{-\frac{\omega_{\mathbf{k}}}{k_B T}} + \dots \end{aligned} \quad (5.37)$$

Ordens superiores nas séries acima não são levadas em conta pois decrescem rapidamente quando  $T \rightarrow 0$ . Logo substituindo (5.37) nas equações (5.34), (5.35) e (5.36) recuperamos as expressões para os parâmetros de ordem singlete e tripleto, no limite de temperaturas baixas:

$$\bar{s}^2 = 1 + \frac{J}{Zt} - \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{k}} \sqrt{1 + \frac{2\lambda(\mathbf{k})}{Z}} + \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \sqrt{1 + \frac{2\lambda(\mathbf{k})}{Z}} e^{-\frac{\omega_{\mathbf{k}}}{k_B T}} \left(1 - \frac{\omega_{\mathbf{k}}}{k_B T}\right) + \xi, \quad (5.38)$$

$$\bar{t}^2 = 1 - \frac{J}{Zt} - \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{\sqrt{1 + \frac{2\lambda(\mathbf{k})}{Z}}} + \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{\sqrt{1 + \frac{2\lambda(\mathbf{k})}{Z}}} e^{-\frac{\omega_{\mathbf{k}}}{k_B T}} \left(1 - \frac{\omega_{\mathbf{k}}}{k_B T}\right) + \xi, \quad (5.39)$$

onde

$$\xi = -\frac{1}{2} e^{-\frac{\omega_0}{2k_B T}} \left(1 - \frac{\omega_0}{k_B T}\right). \quad (5.40)$$

Note-se que das expressões acima só a equação para o parâmetro de ordem tripleto se anula quando  $(J/Zt) = (J/Zt)_c$ .

## 5.9 Caráter do ponto crítico quântico

O estado magnético ordenado está associado às relações  $\bar{t} \neq 0$  e  $\bar{s} \neq 0$  pois a magnetização staggered é dada por  $m_s = \bar{s}\bar{t}$ ; como  $\bar{s}$  não se anula, a transição do estado magnético ordenado para o desordenado fica caracterizado por  $\bar{t} = 0$  como foi demonstrado para o caso  $T = 0$ .

Na seção (5.7) obtivemos o valor do  $(J/t)_c$  para  $T = 0$  em duas e três dimensões. Consideraremos agora  $T \neq 0$  e encontraremos a expressão para a descoberta do ponto crítico quântico.

Começaremos fazendo  $\bar{t} = 0$  na equação (5.39), então temos:

$$0 = 1 - \frac{J}{Zt} - \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{\sqrt{1 + \frac{2\lambda(\mathbf{k})}{Z}}} + \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{\sqrt{1 + \frac{2\lambda(\mathbf{k})}{Z}}} e^{-\frac{\omega_{\mathbf{k}}}{k_B T}} \left( 1 - \frac{\omega_{\mathbf{k}}}{k_B T} \right) + \xi,$$

Como podemos definir  $(J/Zt)_c = 1 - \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{\sqrt{1 + \frac{2\lambda(\mathbf{k})}{Z}}}$  obtemos,

$$0 = \left( \frac{J}{Zt} \right)_c - \frac{J}{Zt} + \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{\sqrt{1 + \frac{2\lambda(\mathbf{k})}{Z}}} e^{-\frac{\omega_{\mathbf{k}}}{k_B T}} \left( 1 - \frac{\omega_{\mathbf{k}}}{k_B T} \right) + \xi,$$

lembrando a definição da distância ao ponto crítico quântico  $g$  e da expressão para  $\xi$ , obtemos

$$\frac{g}{Z} = -\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{\sqrt{1 + \frac{2\lambda(\mathbf{k})}{Z}}} e^{-\frac{\omega_{\mathbf{k}}}{k_B T}} \left( 1 - \frac{\omega_{\mathbf{k}}}{k_B T} \right) + \frac{1}{2} e^{-\frac{\omega_0}{2k_B T}} \left( 1 - \frac{\omega_0}{k_B T} \right) \quad (5.41)$$

onde  $g = |(J/t)_c - (J/t)|$ . Esta relação é muito importante para nossos futuros cálculos já que de sua solução poderemos calcular o ponto crítico quântico  $(J/t)_c$  para qualquer dimensão e temperatura suficientemente baixa. Nas próximas seções trataremos de resolver esta equação para duas e três dimensões, com a finalidade de

poder esboçar o diagrama  $T/J$  vs  $J/t$ . Finalmente na última seção deste capítulo trataremos de encontrar numericamente a soma em  $\mathbf{k}$  para dimensões  $d \geq 2$ .

## 5.10 Diagramas de Fase do modelo colar de Kondo a baixas temperaturas

### 5.10.1 Em duas dimensões

Em duas dimensões  $Z = 4$  (rede quadrada) e a equação (5.41) tem a seguinte forma:

$$\frac{1}{4} \left[ \left( \frac{J}{t} \right)_c - \left( \frac{J}{t} \right) \right] = -\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{\sqrt{1 + \frac{2\lambda(\mathbf{k})}{4}}} e^{-\frac{\omega_{\mathbf{k}}}{k_B T}} \left( 1 - \frac{\omega_{\mathbf{k}}}{k_B T} \right) + \frac{1}{2} e^{-\frac{\omega_0}{2k_B T}} \left( 1 - \frac{\omega_0}{k_B T} \right) \quad (5.42)$$

onde achando a soma no estado fundamental obtemos  $(J/4t)_c = 0.35712$ , portanto a equação (5.42) fica como,

$$0,35712 - \frac{J}{4t} = -\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{\sqrt{1 + \frac{2\lambda(\mathbf{k})}{4}}} e^{-\frac{\omega_{\mathbf{k}}}{k_B T}} \left( 1 - \frac{\omega_{\mathbf{k}}}{k_B T} \right) + \frac{1}{2} e^{-\frac{\omega_0}{2k_B T}} \left( 1 - \frac{\omega_0}{k_B T} \right) \quad (5.43)$$

Transformando a soma em uma integral no limite termodinâmico ( $N \rightarrow \infty$ ) e considerando  $\mathbf{k} \rightarrow 0$ , (lembre que  $a = 1$ ) encontramos,

$$\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{\sqrt{1 + \frac{2\lambda(\mathbf{k})}{4}}} e^{-\frac{\omega_{\mathbf{k}}}{k_B T}} \left( 1 - \frac{\omega_{\mathbf{k}}}{k_B T} \right) = 0 \quad (5.44)$$

Na próxima seção nos ocuparemos com mais detalhe da solução desta soma no caso geral d-dimensional. Finalmente substituindo (5.44) em (5.43) obtemos:

$$0.35712 - \frac{J}{4t} = \frac{1}{2} e^{-\frac{\omega_0}{2k_B T}} \left( 1 - \frac{\omega_0}{k_B T} \right) \quad (5.45)$$

onde

$$\omega_0 = 2t\bar{s}^2$$

A equação (5.45) deve ser resolvida para obtermos o diagrama  $T/J$  vs  $J/t$  em duas dimensões. Ao determiná-la encontramos que esta é inconsistente para qualquer valor de temperatura, exceto para  $T = 0$ , o que está em completo acordo com o “Teorema de Mermin-Wagner” [72]. Por conseguinte só haverá transição de fase quântica no estado fundamental. Na figura (5.6) se mostra a comprovação esquemática disto para um intervalo de temperaturas entre 0.0001 e 0.1K; para todas estas só haverá uma única solução correspondente ao valor crítico  $(J/t)_c \approx 1.4284$ .

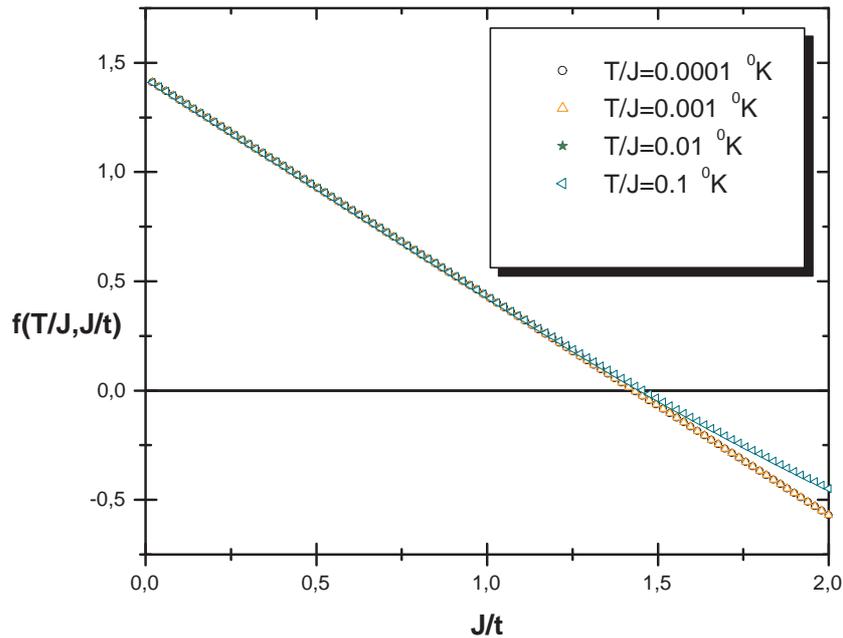


Figura 5.6: Gráfico da equação (5.45) para vários valores de temperatura, as quais só atingem um valor do eixo ( $J/t$ ), dado por  $(J/t)_c \approx 1.4284$ .

Nós mencionaremos aqui de forma breve o que acontece quando a temperatura entra em ação. É de se esperar que os estados excitados termicamente reduzam as correlações de spin e que para  $k_B T \gg J$  os spins a grandes distâncias não estejam mais correlacionados. Existirá então uma temperatura  $T_c$  para a qual ocorre uma transição entre uma fase ordenada e uma desordenada. Embora, a dimensionalidade do sistema tem um drástico efeito sobre esta quebra de simetria. Mermin e Wagner num trabalho de 1966 demonstraram que em modelos unidimensionais e bi-dimensionais com interação de curto alcance<sup>9</sup> tal que seus estados fundamentais quebram alguma simetria contínua do Hamiltoniano, a temperatura crítica é estritamente igual a zero. Ou seja, a ordem de longo alcance é instável para todos os spins na presença de flutuações térmicas.

### 5.10.2 Em três dimensões

Neste caso temos que  $Z = 6$ , substituindo na equação (5.41) obtemos:

$$\frac{1}{6} \left[ \left( \frac{J}{t} \right)_c - \left( \frac{J}{t} \right) \right] = -\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{\sqrt{1 + \frac{2\lambda(\mathbf{k})}{6}}} e^{-\frac{\omega_{\mathbf{k}}}{k_B T}} \left( 1 - \frac{\omega_{\mathbf{k}}}{k_B T} \right) + \frac{1}{2} e^{-\frac{\omega_0}{2k_B T}} \left( 1 - \frac{\omega_0}{k_B T} \right) \quad (5.46)$$

onde achando a soma no estado fundamental obtemos  $(J/6t)_c = 0.44234$ , portanto a equação (5.46) fica como,

$$0.44234 - \left( \frac{J}{6t} \right) = -\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{\sqrt{1 + \frac{2\lambda(\mathbf{k})}{6}}} e^{-\frac{\omega_{\mathbf{k}}}{k_B T}} \left( 1 - \frac{\omega_{\mathbf{k}}}{k_B T} \right) + \frac{1}{2} e^{-\frac{\omega_0}{2k_B T}} \left( 1 - \frac{\omega_0}{k_B T} \right) \quad (5.47)$$

---

<sup>9</sup>À interação de curto alcance corresponde a um decaimento exponencial da correlação spin-spin AF e da existência de um comprimento finito característico  $\xi$  que indica até que distância dois spins permanecem correlacionados antiferromagneticamente.

Trabalhando da mesma forma que em duas dimensões, transformamos a soma em uma integral no limite termodinâmico e consideramos  $\mathbf{k} \rightarrow 0$  temos:

$$\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{\sqrt{1 + \frac{2\lambda(\mathbf{k})}{6}}} e^{-\frac{\omega_{\mathbf{k}}}{k_B T}} \left(1 - \frac{\omega_{\mathbf{k}}}{k_B T}\right) = -\frac{3\sqrt{6}}{\pi^2} \left(\frac{k_B T}{\omega_0}\right)^2 \quad (5.48)$$

Finalmente levando em conta o valor da soma (5.48), encontramos à equação primária que permite encontrar a forma da linha crítica de Neel do modelo colar de Kondo em três dimensões. Assim,

$$0.44234 - \frac{J}{6t} = \frac{3\sqrt{6}}{\pi^2} \left(\frac{k_B T}{\omega_0}\right)^2 + \frac{1}{2} e^{-\frac{\omega_0}{2k_B T}} \left(1 - \frac{\omega_0}{k_B T}\right) \quad (5.49)$$

onde

$$\omega_0 = 3t\bar{s}^2$$

Comparando o segundo e o terceiro termo da esquerda na equação (5.49) fazemos uma aproximação considerando o limite quando  $T \rightarrow 0$  com isso pode se observar que o último termo cai mais rapidamente a zero, então nesta aproximação podemos considerar apenas o primeiro termo. Desse modo a expressão (5.49) fica como:

$$0.44234 - \frac{J}{6t} = \frac{3\sqrt{6}}{\pi^2} \left(\frac{k_B T}{\omega_0}\right)^2 \quad (5.50)$$

Lembre que tomamos a temperatura próxima do QCP, isso faz com que o parâmetro de ordem singleto (da expressão (5.38)) possa ter o valor  $\bar{s} = 1$ . Depois de considerar a constante de Boltzman  $k_B = 1$  obtemos

$$\omega_0 = 3t \quad (5.51)$$

Então inserindo o resultado (5.51) na equação (5.50) encontramos:

$$0.44234 - \frac{J}{6t} = \frac{3\sqrt{6}}{\pi^2} \left(\frac{T}{3t}\right)^2$$

que pode ser reescrito como,

$$0.44234 - \frac{J}{6t} = \frac{\sqrt{6}}{3\pi^2} \left( \frac{T}{t} \right)^2 \quad (5.52)$$

Esta equação (5.52) é a expressão que nos permite encontrar a linha crítica de Neel do diagrama  $T/J$  vs  $J/t$  no modelo colar de Kondo em três dimensões; esta saindo do ponto crítico quântico  $(J/t)_c \approx 2.654$  seguindo a lei  $T_N \propto |(J/t) - (J/t)_c|^\psi$  com o expoente crítico de deslocamento  $\psi = 1/2$  o qual está de acordo com a teoria de escala, a qual define o expoente crítico de deslocamento como,

$$\psi = \frac{1}{d-1} = \frac{z}{d+z-1}$$

onde  $z$  é o expoente dinâmico o qual é  $z = 1$  no caso AF e  $z = 2$  no caso FR e  $d$  a dimensão. Para nosso caso  $z = 1$  e  $d = 3$ , com o que temos  $\psi = 1/2$ .

A figura (5.7) apresenta o diagrama de fase onde se mostra a linha crítica de Neel saindo do valor  $(J/t)_c = 2.654$ .

## 5.11 Comportamento da linha crítica de Neel em d-dimensões

Como vimos na seção anterior, a expressão que apresenta o caráter da linha crítica depende em grande medida de uma soma em  $\mathbf{k}$  de difícil solução. Nesta parte da dissertação, trabalhamos com essa soma e a calculamos em d-dimensões. Fazemos isso convertendo a soma em  $\mathbf{k}$  em uma integral d-dimensional no limite termodinâmico e considerando  $\mathbf{k} \rightarrow 0$ . Assim então,

$$\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{\sqrt{1 + \frac{2\lambda(\mathbf{k})}{Z}}} e^{-\frac{\omega_{\mathbf{k}}}{k_B T}} \left( 1 - \frac{\omega_{\mathbf{k}}}{k_B T} \right) = \frac{1}{(2\pi)^d} \int S_d k^{d-1} dk \frac{1}{\sqrt{1 + \frac{2\lambda(\mathbf{k})}{Z}}} e^{-\frac{\omega_{\mathbf{k}}}{k_B T}} \left( 1 - \frac{\omega_{\mathbf{k}}}{k_B T} \right) \quad (5.53)$$

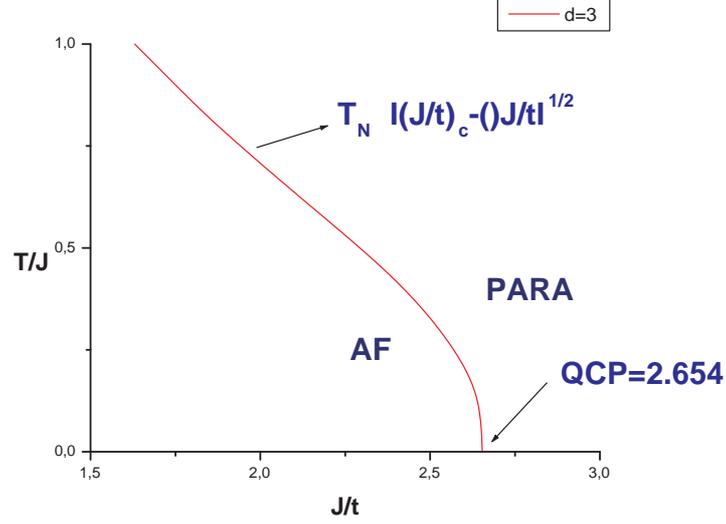


Figura 5.7: Gráfico  $T/J$  vs  $J/t$  do modelo colar de Kondo em três dimensões. Observe que a linha crítica que separa o estado ordenado AF do estado desordenado paramagnético (PARA) sai do ponto crítico quântico  $(J/t)_c \approx 2.654$  seguindo a lei  $T_N \propto |(J/t) - (J/t)_c|^\psi$  onde  $\psi = 1/2$  [73].

onde

$$\omega_{\mathbf{k}} = \omega_0 \sqrt{1 + \frac{2\lambda(\mathbf{k})}{Z}}. \quad (5.54)$$

Logo, definimos:

$$I = \frac{S_d}{(2\pi)^d} \int k^{d-1} dk \frac{1}{\sqrt{1 + \frac{2\lambda(\mathbf{k})}{Z}}} e^{-\frac{\omega_0 \sqrt{1 + \frac{2\lambda(\mathbf{k})}{Z}}}{k_B T}} \left( 1 - \frac{\omega_0 \sqrt{1 + \frac{2\lambda(\mathbf{k})}{Z}}}{k_B T} \right) \quad (5.55)$$

Como estamos trabalhando numa rede AF então expandimos próximo de  $Q \approx k$  considerando  $k = Q - q$  pelo qual  $\lambda(\mathbf{k})$  tem que ser expandido em series de Fourier considerando  $q$  pequeno,

$$\cos(Q - k) = \cos Q + \frac{\partial}{\partial k} \cos(Q - k)|_{k=Q} (-k) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial k^2} \cos(Q - k)|_{k=Q} (-k)^2 + \dots$$

Considerando o eixo  $x$ ,

$$\cos k_x = \cos(Q - k_x) \approx -1 + \frac{1}{2}k_x^2$$

No caso geral, de uma rede hiper-cúbica  $d$ -dimensional onde  $Z = 2d$  temos,

$$\lambda(\mathbf{k}) = -d + \frac{1}{2}k^2$$

portanto, obtemos

$$\sqrt{1 + \frac{2\lambda(\mathbf{k})}{Z}} = \frac{k}{\sqrt{2d}} \quad (5.56)$$

com isso a integral  $d$ -dimensional, considerando  $k_B = 1$ , tem a forma,

$$I = \frac{\sqrt{2d}S_d}{(2\pi)^d} \int k^{d-2} dk e^{-\frac{\omega_0 k}{T\sqrt{2d}}} \left(1 - \frac{\omega_0 k}{T\sqrt{2d}}\right) \quad (5.57)$$

Com uma mudança de variáveis da forma  $k/T = q$ , e chamando  $a = \omega_0/\sqrt{2d}$  chegamos à seguinte integral dependente da temperatura  $T$ ,

$$I = \frac{\sqrt{2d}S_d T^{d-1}}{(2\pi)^d} \int_0^\infty q^{d-2} e^{-aq} (1 - aq) dq \quad (5.58)$$

o limite superior da integral é o infinito devido a que estamos trabalhando a baixas temperaturas<sup>10</sup>. Considerando a integral como função da dimensão, esta se mostra como,

$$I = \frac{\sqrt{2d}S_d T^{d-1}}{(2\pi)^d} f(d) \quad (5.59)$$

Utilizamos o MAPLE para encontrar a integral  $f(d)$  para algumas dimensões  $d = 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8$ , e obtemos a tabela (5.1).

Com os valores achados na tabela (5.1) podemos encontrar o valor da integral (5.59) para cada dimensão. Assim obtemos a tabela (5.2),

---

<sup>10</sup>Lembre que  $q = k/T$ , quando a temperatura  $T \rightarrow 0$ ,  $q \rightarrow \infty$ .

	$d = 2$	$d = 3$	$d = 4$	$d = 5$	$d = 6$	$d = 7$	$d = 8$
$f(d)$	0	$-1/a^2$	$-4/a^3$	$-18/a^4$	$-95/a^5$	$-600/a^6$	$-4320/a^7$

 Tabela 5.1: Valores da integral  $f(d)$  em função da dimensão.

	$d = 2$	$d = 3$	$d = 4$	$d = 5$	$d = 6$	$d = 7$	$d = 8$
$I$	0	$-\frac{\sqrt{6}}{3\pi^2} \left(\frac{T}{t}\right)^2$	$-\frac{1}{4\pi^3} \left(\frac{T}{t}\right)^3$	$-\frac{36\sqrt{10}}{25\pi^4} \left(\frac{T}{t}\right)^4$	$-\frac{32}{3\pi^5} \left(\frac{T}{t}\right)^5$	$-\frac{2400\sqrt{14}}{343\pi^6} \left(\frac{T}{t}\right)^6$	$-\frac{135}{2\pi^7} \left(\frac{T}{t}\right)^7$

 Tabela 5.2: Valores de  $I(d, T)$  em função da dimensão.

A solução da equação (5.41) para valores de dimensão entre  $2 \leq d \leq 8$ , dada pela tabela (5.2), nos dá a forma da linha crítica de Neel. Note-se a dependência desta linha com a dimensão e a temperatura sendo um exemplo claro quando a achamos em 3-d.

Desta forma nós encontramos a forma geral da linha crítica de Neel dependendo da temperatura como  $T^{d-1}$ , onde  $d$  é sua dimensão.

# Capítulo 6

## Conclusões e Perspectivas

O objetivo desta dissertação foi o estudo das transições quânticas do modelo colar de Kondo a temperatura finita. Para isso resolvemos o modelo a baixas temperaturas em uma aproximação de campo médio e utilizando o método das funções de Green para encontrar as excitações elementares do Hamiltoniano. Desta solução encontramos a energia livre do modelo colar de Kondo a temperatura finita.

Uma vez obtida a energia livre, encontramos os diversos diagramas de fase tanto no estado fundamental como a baixas temperaturas em duas e três dimensões. Em duas dimensões encontramos que só haverá transição no estado fundamental ( $T = 0$ ) o que está de acordo com o Teorema de Mermin Wagner. Em três dimensões achamos o diagrama  $T/J$  vs  $J/t$  e encontramos o expoente de deslocamento  $\psi$  da linha crítica de Neel, a qual sai do ponto crítico quântico como  $T_N = |g|^\psi$  com  $\psi = 1/2$  o que esta de acordo com a teoria de escala quando temos um arranjo AF,  $z = 1$ .

Para finalizar, deixamos questões abertas a serem estudadas no futuro.

- A inclusão de um campo magnético ( $H$ ) no Hamiltoniano do modelo colar de Kondo considerando os efeitos de temperatura e campo magnético sobre o diagrama de fase deste modelo, isto é o diagrama  $H$  vs  $T$  vs  $J/t$ .

- O cálculo de propriedades físicas (calor específico, susceptibilidade) na região líquido de Fermi e não líquido de Fermi que seja válido no esquema da teoria de escala.

# Apêndice A

## O Método das Funções de Green:

Neste apêndice apresenta-se brevemente as definições básicas da técnica das funções de Green descritas por Zubarev [74]. O emprego das funções de Green nos problemas de mecânica estatística e estado sólido, é adequado ao utilizá-las nos diversos modelos que envolvem operadores quânticos. Este nos permite o cálculos de diversos valores médios desses operadores.

Seja  $Y$  um operador qualquer, define-se:

$$\langle Y \rangle = \frac{1}{Z} \text{tr} \{ Y e^{-\beta(\mathcal{H} - \mu N)} \}; Z = \text{tr} \{ e^{-\beta(\mathcal{H} - \mu N)} \} \quad (\text{A.1})$$

onde  $\langle \dots \rangle$  indica a média estatística usual,  $\mathcal{H}$  é o Hamiltoniano do sistema,  $N$  o operador de número total de elétrons,  $\beta = 1/k_B T$  ( $k_B$  a constante de Boltzman,  $T$  a temperatura absoluta) e  $\mu$  o potencial químico. Sejam agora dois operadores  $A(t)$  e  $B(t')$  na representação de Heisenberg ( $\hbar = 1$ ):

$$A(t) = e^{i\mathcal{H}t} A(0) e^{-i\mathcal{H}t} \quad (\text{A.2})$$

$$B(t) = e^{i\mathcal{H}t} B(0) e^{-i\mathcal{H}t} \quad (\text{A.3})$$

As funções de Green retardada (+) e avançada (−) são definidas por:

$$\ll A(t); B(t') \gg_{\pm} = \mp \theta(t - t') \langle [A(t), B(t')]_{\eta} \rangle \quad (\text{A.4})$$

onde  $[A(t), B(t')]_{\eta} = A(t)B(t') - \eta B(t')A(t)$ , e  $\eta = 1$  ou  $-1$  se os operadores são bosônicos ou fermiônicos respectivamente; e  $\theta(t)$  é a função de degrau de Heavyside:

$$\theta(t) = \begin{cases} 1 & \text{se } t > 0 \\ 0 & \text{se } t < 0 \end{cases}, \quad (\text{A.5})$$

As funções de Green (A.4) satisfazem a equação de movimento:

$$i \frac{d}{dt} \ll A(t); B(t') \gg_{\pm} = \delta(t - t') < [A(t), B(t')]_{\eta} > + \ll [A(t), \mathcal{H}]_{-}; B(t') \gg_{\pm} \quad (\text{A.6})$$

Como  $\ll A(t); B(t') \gg_{\pm}$  são funções de  $(t - t')$ , pode-se definir para  $z$  real, a transformada de Fourier:

$$\ll A(t); B(t) \gg_{\pm, z} = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \ll A(t); B(0) \gg_{\pm} e^{izt} dt. \quad (\text{A.7})$$

No caso da função de Green retardada, a integral (A.7) converge também para valores complexos de  $z$ , desde que  $\text{Im}(z) > 0$ . Desta maneira, a definição de  $\ll A; B \gg_{+}$  pode ser estendida para o plano complexo e é uma função regular na parte superior do plano complexo  $z$ . De maneira análoga,  $\ll A; B \gg_{-}$  é regular na parte inferior do plano. Podemos, por tanto introduzir a definição:

$$\ll A; B \gg_z = \begin{cases} \ll A; B \gg_{+, z} & \text{se } \text{Im}(z) > 0 \\ \ll A; B \gg_{-, z} & \text{se } \text{Im}(z) < 0 \end{cases}, \quad (\text{A.8})$$

que é regular em todo o plano complexo  $z$ , exceto sobre o eixo real. A partir das equações (A.7) e (A.8) obtém-se a equação de movimento dos propagadores:

$$z \ll A(t); B(t') \gg_z = \frac{1}{2\pi} < [A, B]_{\eta} > + \ll [A(t), \mathcal{H}]_{-}; B(t') \gg_z; \quad (\text{A.9})$$

e a relação fundamental de Zubarev que relaciona a média térmica  $< BA >$  com as funções de Green:

$$< B(t')A(t) > = i \lim_{\delta \rightarrow 0^+} \int_{-\infty}^{\infty} dz [\ll A; B \gg_{z+i\delta} - \ll A; B \gg_{z-i\delta}] \left\{ \frac{e^{iz(t-t')}}{e^{\beta(z-\mu)} - \eta} \right\}. \quad (\text{A.10})$$

Utilizando a notação de Hamann, o resultado anterior pode ser assim escrito:

$$\langle BA \rangle = F_z[\ll A; B \gg_z] \quad (\text{A.11})$$

No caso em que os operadores A e B são adjuntos hermitianos pode-se escrever:

$$\langle B(t)A(t) \rangle = -2Im \int_{-\infty}^{\infty} \ll A; B \gg_z f(z) dz, \quad (\text{A.12})$$

onde

$$f(z) = \frac{1}{e^{\beta(z-\mu)} - \eta} \quad (\text{A.13})$$

é a função de Fermi-Dirac.

OBSERVAÇÃO: Este apêndice foi totalmente baseado na referência [75].

# Bibliografia

- [1] Proceedings of the International Conference on Strongly Correlated Electron Systems SCES'94, *Physica B* 186-188 (1993).
- [2] G. R. Stewart , *Rev. Mod. Phys.* **56(4)**, 755 (1984).
- [3] S. Doniach, *Physica B* **91**, 231 (1977).
- [4] S. Sachdev e N. R. Bhatt, *Phys. Rev. B* **41**, 9323 (1990).
- [5] G. R. Stewart, *Rev. Mod. Phys.* **73**, 797 (2001).
- [6] F. Steglich, C. Geibel, R. Modler, M. Lang, P. Hellmann e P. Gegenwart, *J. Low. Temp. Phys.* **99**, 267 (1995).
- [7] S. Qimiao , S. Llewelun e K. Ingersent, *Int. J. Mod. Phys. B* **13**, 18 (1999).
- [8] M. A. Continentino, *Quantum Scaling in Many-Body Systems*, Ed. World Scientific (2001).
- [9] F. Steglich, J. Aarts, C. D. Bredl, W. Lieke, D. Meschede, W. Franz e H. Schäfer, *Phys. Rev. Lett.* **43**, 1892 (1979).
- [10] J. A. Hertz, *Phys. Rev. B* **14**, 1165(1976).
- [11] J. A. Millis, *Phys. Rev. B* **48**, 7183 (1993).
- [12] T. Moriya e T. Takimoto, *J. Phys. Soc. Jpn.* **64**, 960 (1995).

- [13] Grosche e col., *Physica B* **206-207**, 20 (1995).
- [14] B. Bogenberger e v. Löhneysen , *Phys. Rev. Lett.* **74**, 1016 (1995).
- [15] M. A. Continentino, *Phys. Rev. B* **47**, 11587 (1993).
- [16] A. M. Tsvelik e M. Reizer, *Phys. Rev. B* **48**, 9887 (1993).
- [17] A. Schröder, G. Aeppli, E. Bucher, R. Ramazashvili e P. Coleman, *Phys. Rev. Lett.* **80**, 5693 (1998).
- [18] Q. Si, S. Rabello, K. Ingersent, J. L. Smith , H. R. Krishnamurthy, R. Pandit e T. V. Ramakrishnan, *Nature* **413**, 804 (2001).
- [19] A. Schröder et. al., *Nature* **407**, 351 (2000).
- [20] F. M. Grosche, S. R. Julian, N. D. Mathur e G. C. Lonzarich, *Physica B* **223-224**, 50 (1996).
- [21] Walker I. R., Grosche F. M., Freye D. M. e Lonzarich G. G., *Physica C*, zbf282-287, 303 (1997)
- [22] S. Süllo, M. C. Aronson, B. D. Rainford e P. Haen , *Phys. Rev. Lett.* **82**, 2963 (1999).
- [23] N. H. Andersen e H. Smith, *Phys. Rev. B* **19**, 384 (1979).
- [24] M. A. Continentino, S. N. de Medeiros, M. T. D. Orlando, M. B. Fontes e E. M. Baggio-Saitovitch, *Phys. Rev. B* **64**, 012404 (1993).
- [25] T. Burghardt, A. Eichler, S. Süllo e J. A. Mydosh, *Physica B* **99**, 259 (1999).
- [26] J. Larrea, *Tese de Doutorado*, Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas (2003).
- [27] J. Larrea, M. B. Fontes, A. D. Alvarenga, E. M. Baggio-Saitovitch, T. Burghardt, A. Eichler e M. A. Continentino, *submetido a Phy. Rev. B* (2004).

- [28] K. Heuser, E. W. Scheidt, T. Schreiner e G. R. Stewart, *Phys Rev. B* **57**, 4198 (1998).
- [29] Heuser et. al., *Physica B* **259-261**, 392 (1999).
- [30] A. Galatanu, R. Hauser, G. Gilscher, H. Michor, L. Naber e E. Bauer, *Physica B* **83**, 281 (2000).
- [31] v. Löhneysen, H. C. Pfeiderer, T. Pietrus, O. Stockert e B. Will, *Phys. Rev. B* **63**, 134411 (2001).
- [32] F. Steglich, P. Gegenwart, C. Geibel, A. Hinze, M. Lang, C. Langhammer, G. Sparn e O. Trovarelli, *Physica B* **280**, 349 (2000).
- [33] R. Movshovich, T. Graf, D. Madrus, J.D. Thompson, J.L. Smith y Z. Fisk, *Phys. Rev. B* **53**, 8241 (1996).
- [34] L.C. Gupta, D.E. MacLaughlin, C. Tien, C. Godart, M.A. Edward e R.D. Parks, *Phys. Rev. B* **28**, 3673 (1983).
- [35] N.D. Mathur, F.M. Grosche, S.R. Julian, I.R. Walker, D.M. Freye, R.K.W. Haselwimmer e G.G. Lonzarich, *Nature*, **394** 39 (1998).
- [36] J. Kondo, *Prog. Theor. Phys.* **32**, 37 (1964).
- [37] C. Lacroix, *J. Appl. Phys.* **53**, 2131 (1982).
- [38] A. A. Abrikosov, *Physics* **2**, 5, (1965).
- [39] J. Kondo, *Solid. Stat. Phys.* **23**, 183 (1969).
- [40] K. G. Wilson, *Rev. Mod. Phys.* **47**, 773 (1975).
- [41] N. Andrei, K. Furuya e J. Lowenstein, *Rev. Mod. Phys.* **55**, 2333 (1983).

- [42] M. A. Ruderman e C. Kittel, *Phys. Rev.* **96**, 99 (1954).
- [43] T. Kasuya, *Prog. Theor. Phys.* **16**, 45 (1956).
- [44] K. Yosida, *Phys. Rev.* **106**, 895 (1957).
- [45] M. A. Continentino, G. M. Japiassu e A. Troper, *Phys. Rev. B* **39**, 9734 (1989).
- [46] P. Coleman, *Phys. Rev. B* **28**, 5255 (1984).
- [47] M. Lavagna, C. Lacroix e M. Cryot, *J. Phys. F: Met. Phys.* **13**, 1007 (1983).
- [48] M. Lavagna, C. Lacroix e M. Cryot, *Phys. Lett.* **90A**, 210 (1982).
- [49] J. R. Schrieffer e P. A. Wolff, *Phys. Rev.* **149**, 491 (1966).
- [50] M. P. Gelfand, R. R. Singh e D. A. Huse, *Phys. Rev. B* **40**, 10801 (1989).
- [51] D. K. Yu, Q. Gu, H. T. Wang e J. L. Shen, *Phys. Rev. B* **59**, 111 (1998).
- [52] H. T. Wang, H. Q. Lin e J. L. Shen, *Phys. Rev. B* **61**, 4019 (1999).
- [53] G. M. Zhang, Q. Gu e L. Yu, *Phys. Rev. B* **62**, 76 (2000).
- [54] C. Jurecka e W. Brenig, *Phys. Rev. B* **61**, 092406 (2001).
- [55] S. Sachdev e K. Park, *Phys. Rev. B* **64**, 184510 (2001).
- [56] K. Hida, M. Shiino e W. Chen, *cond-mat/ 0402008* (2004).
- [57] N. Shibata, T. Nishino, K. Ueda e C. Ishii, *Phys. Rev. B* **53**, 828 (1996).
- [58] Z. P. Shi, R. R. Singh, M. P. Gelfand, e Z. Wang, *Phys. Rev. B* **51**, 15630 (1995).
- [59] Z. Wang, X. P. Li, e D. H. Lee, *Physica B* **199-200**, 463 (1984).
- [60] F. F. Assaad, *Phys. Rev. Lett.* **83**, 796 (1999).

- [61] M. Vekic, J. W. Cannon, D. J. Scalapino, R. T. Scalettar, e R. L. Sugar, *Phys. Rev. Lett.* **74**, 2367 (1995).
- [62] M. Jarrel, *Phys. Rev. B* **51**, 7429 (1995).
- [63] A. Saguia e M. S. Sarandy, *quant-ph* 0208133, (2004).
- [64] C. Godart, L. C. Gupta, C. V. Tomy, J. D. Thompson e R. Vijayaraghavan, *Europhys. Lett.* **8**, 375 (1989).
- [65] M. A. Continentino e T. G. Rappoport, *J.Phys. A: Math. Gen.* **34**, 10829 (2001).
- [66] A. L. Cornelius e J. S. Schilling, *Phys. Rev. B* **49**, 3955 (1994).
- [67] R. Jullien, J. N. Fields, e S. Doniach, *Phys. Rev. B* **16**, 4889 (1977).
- [68] P. Santini e J. Solyom, *Phys. Rev. B* **46**, 7422 (1992).
- [69] R. T. Scalettar, D. J. Scalapino. e R. J. Sugar, *Phys. Rev. B* **31**, 7316 (1985).
- [70] R. Jullien e P. Pfeuty, *J. Phys. F* **11**, 353 (1981).
- [71] H. Tsunetsugu, Y. Hatsugai, K. Ueda, e M. Sigrist, *Phys. Rev. B* **46**, 3175 (1992).
- [72] N. D. Mermin e H. Wagner, *Phys. Rev. Lett.* **17**, 1133 (1966).
- [73] D. Reyes, M. A. Continentino, A. Troper e A. Saguia *aceito para publicação no Physica B* (2004).
- [74] D. N. Zubarev, *Usp. Fiz. Nauk.* **71**, 71 (1960).
- [75] A. Troper, *Notas sobre funções de Green* Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas-CBPF.