



UNIVERSIDADE FEDERAL DO PIAUÍ  
CENTRO DE CIÊNCIAS DA NATUREZA  
PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA  
MESTRADO EM FÍSICA

**Ferromagnetismo no Modelo de Anderson Periódico  
Bidimensional com Depleções Regulares**

**Maykon Vinícius Monteiro de Araújo**

**Teresina - Março de 2017**

**Maykon Vinícius Monteiro de Araújo**

**Dissertação de Mestrado:**

**Ferromagnetismo no Modelo de Anderson Periódico  
Bidimensional com Depleções Regulares**

Dissertação submetida à Coordenação do Curso de Pós-Graduação em Física da Universidade Federal do Piauí, como requisito parcial para obtenção do grau de Mestre em Física.

Orientador:

Prof. Dr. José Pimentel de Lima (DF-UFPI)

**Teresina - Março de 2017**

FICHA CATALOGRÁFICA  
Serviço de Processamento Técnico da Universidade Federal do Piauí  
Biblioteca Setorial de Ciências da Natureza - CCN

A663f      Araújo, Maykon Vinicius Monteiro de.  
              Ferromagnetismo no modelo de Anderson periódico  
bidimensional com depleções regulares / Maykon Vinicius  
Monteiro de Araújo. – Teresina: 2017.  
              62 f.: il. color

Dissertação (mestrado) – Universidade Federal do Piauí,  
Centro de Ciências da Natureza, Pós-graduação em Física,  
2017.

Orientador: Prof. Dr. José Pimentel de Lima.

1. Física. 2. Matéria Condensada. 3. Modelo de Anderson.  
4. Depleções. I. Título.

CDD 530.41

# Ferromagnetismo no Modelo de Anderson Periódico Bidimensional com Depleções Regulares

Maykon Vinicius Monteiro de Araújo

Dissertação de Mestrado apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física do Centro de Ciências da Natureza-CCN/UFPI.

Comissão Julgadora:



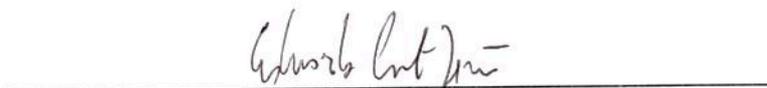
---

Prof. Dr. José Pimentel de Lima (Orientador)



---

Prof. Dr. Irismar Gonçalves da Paz/UFPI



---

Prof. Dr. Eduardo Costa Girão/UFPI



---

Prof. Dr. Raimundo Rocha dos Santos/UFRJ

Aprovada em 30/03/2017

# Agradecimentos

Agradeço a minha querida mãe Francisca Maria Monteiro de Araújo, aos meus avós, e também pais, Maria da Conceição Monteiro de Araújo e Raimundo Alves de Araújo, por toda a dedicação como pais, pela paciência e pelo apoio que sempre me deram, me permitindo ser o homem que sou hoje. Muito obrigado!

Aos meus tios Maria Gorete de Araújo Alencar e Augusto César de Alencar por tudo que fizeram por mim, sempre me ajudando de todas as formas que podiam, estando sempre presentes em minha vida.

À minha família inteira por todo o apoio e força que sempre me deram.

Aos meus amigos Éric Carvalho, Oziel Ribeiro, Iago Lira Passos, José Ferreira, Orlando Ribeiro, Isaías Plácido, Gislayllson, Adriel, Lucas Marinho, Carlos Henrique, Fabrício, Paloma, Alexandre, Jadson, Willian, Pedro Barreto, Cícera, Mavson e Pedro Stanley pela amizade e convivência durante todo esse tempo.

Ao professor Raimundo Rocha dos Santos do IF-UFRJ, pelas valiosas sugestões, e disponibilidade para discutir no problema aqui tratado.

Agradeço a Natanael de Carvalho Costa, egresso dessa PG e aluno de doutorado na PG IF-UFRJ, pela proposição do problema e a inestimável colaboração em todas as etapas dessa dissertação.

Ao professor José Pimentel de Lima, que terá minha eterna gratidão! Agradeço por estar sempre disponível às discussões, tanto de Física como dos mais gerais conteúdos, mostrando sempre sua dedicação inigualável como educador, pesquisador e amigo, contribuindo decisivamente para o meu crescimento acadêmico e pessoal. Muito Obrigado Professor!!

À CAPES, à FAPEPI pelo apoio financeiro, além da UFPI pela estrutura física fornecida.

# Resumo

O estudo de sistemas de elétrons correlacionados é importante devido à variedade de fenômenos que podem surgir das correlações. Supercondutividade, magnetismo e o caráter de férmions pesados são exemplos de propriedades que podem surgir como consequência de tais interações eletrônicas. No caso do magnetismo, redes que apresentam momentos magnéticos localizados são mais suscetíveis para a ocorrência de tais fases, de modo que modelos como o de Anderson periódico ou o modelo da rede de Kondo vêm se mostrando eficientes no tratamento destes sistemas. Vários trabalhos mostram como a concentração dos momentos magnéticos pode modificar as propriedades de uma rede [3, 7, 4], de modo que a depleção pode ser considerada uma rota possível para fases magnéticas diversificadas. Neste trabalho abordamos o modelo de Anderson periódico bidimensional, com depleções regulares, em uma rede *bipartite* e em regime *half-filling*, utilizando o método *determinantal quantum monte carlo*, resolvendo exatamente redes de tamanho finito. Partimos de uma análise do fator de estrutura magnético do sistema, em busca de indícios de correlações de longo alcance, fazendo depois uma extrapolação dos resultados para o limite termodinâmico para saber se estas persistem. Analisando as correlações, foi possível verificar a ocorrência de ordenamento ferromagnético para o modelo e a existência de um *crossover* em relação à localização das correlações locais nos sítios, à medida que o acoplamento do sistema varia. A análise das correlações individuais em função do acoplamento da rede oferece um vislumbre dos mecanismos físicos responsáveis pela fase magnética e pelo *crossover* existente.

**Palavras-chave:** Modelo de Anderson periódico, depleção, Monte Carlo quântico.

# Abstract

The study of correlated electron systems is important because of a variety of phenomena that may arise from correlations. Superconductivity, magnetism and the heavy fermions character are examples of phases and properties that may arise as a consequence of such electronic interactions. In the case of magnetism, lattices that present localized magnetic moments are more susceptible to the occurrence of such phases, so that models such as the periodic Anderson model or the Kondo lattice model are efficient in the treatment of these systems. Several works show how the concentration of magnetic moments can modify the properties of a lattice [3, 7, 4], so that depletion can be considered a possible route for diversified magnetic phases. In this work we approach the bidimensional periodic Anderson model, with regular depletions, in a bipartite lattice and in the half-filling regime, using the determinantal quantum monte carlo method, solving exactly lattices of finite size. We start from an analysis of the magnetic structure factor of the system, searching for indications of long-range correlations, and then extrapolating the results to the thermodynamic limit to see if the correlations persist. By analyzing the correlations, it was possible to verify the occurrence of ferromagnetic ordering for the model and the existence of a crossover with respect to the local correlations at the sites, as the system's coupling varies. The analysis of the individual correlations as a function of the lattice's coupling offers a glimpse of the physical mechanisms responsible for the magnetic phase and the existing crossover.

**Keywords:** Periodic Anderson model, depletion, quantum Monte Carlo.

# Sumário

<b>Resumo</b>	<b>iii</b>
<b>Abstract</b>	<b>iv</b>
<b>Introdução</b>	<b>1</b>
<b>1 Modelo de Hubbard</b>	<b>4</b>
1.1 Introdução . . . . .	4
1.2 Modelo de Hubbard . . . . .	5
1.3 Alguns resultados rigorosos para o modelo de Hubbard . . . . .	8
1.3.1 Teorema de Lieb . . . . .	8
1.3.2 Alta densidade de estados eletrônicos . . . . .	10
<b>2 Modelo da rede de Kondo e Modelo de Anderson</b>	<b>12</b>
2.1 Introdução . . . . .	12
2.2 Hamiltoniano da impureza de Kondo . . . . .	14
2.3 Modelo da Rede de Kondo . . . . .	14
2.4 KLM numa rede <i>bipartite</i> e em <i>half filling</i> . . . . .	19
2.4.1 Resultados rigorosos para o KLM <i>half-filled</i> . . . . .	19
2.5 Modelo de Anderson . . . . .	23
2.5.1 Introdução . . . . .	23
2.5.2 PAM . . . . .	24
2.6 Relação entre o PAM e o KLM . . . . .	25
<b>3 KLM e PAM com Depleção</b>	<b>28</b>
3.1 Introdução . . . . .	28
3.2 <i>Kondo hole</i> no KLM . . . . .	29

---

3.3	KLM e PAM com depleção regular . . . . .	32
<b>4</b>	<b>O método de Monte Carlo</b>	<b>34</b>
4.1	Introdução . . . . .	34
4.2	Monte Carlo Clássico . . . . .	35
4.3	Monte Carlo Quântico . . . . .	36
4.3.1	Medidas das grandezas físicas . . . . .	41
4.3.2	O problema do sinal negativo . . . . .	43
<b>5</b>	<b>Modelo de Anderson <i>depleted</i> bidimensional</b>	<b>44</b>
5.1	Introdução . . . . .	44
5.2	Modelo de Anderson <i>depleted</i> 1-D e 2-D . . . . .	44
5.2.1	Caso não interagente ( $U=0$ ) . . . . .	45
5.2.2	Abordagens numéricas para o caso interagente ( $U \neq 0$ ) . . . . .	48
5.2.3	Modelo de Anderson 2-D <i>depleted</i> - Monte Carlo Quântico . . . . .	50
<b>6</b>	<b>Considerações finais</b>	<b>57</b>

# Introdução

Sistemas de elétrons fortemente correlacionados têm atraído muita atenção nas últimas décadas. Sua importância se deve à ampla variedade de fenômenos de interesse físico resultante de tais correlações, como a supercondutividade em altas temperaturas ou a ocorrência de fases magnéticas ordenadas. Vários modelos são propostos no tratamento desses sistemas, dentre os principais citamos o de Hubbard, modelo de Anderson periódico e modelo da rede de Kondo. A dificuldade de tratamento analítico destes modelos faz com que abordagens via Hartree-Fock, *dynamical mean field theory* (DMFT), *density matrix renormalization group* (DMRG) e Monte Carlo, sejam frequentemente utilizadas.

Abordagens como o Modelo de Anderson periódico (PAM) ou o modelo da rede de Kondo (KLM), em que há um orbital magnético localizado para cada sítio da rede, exibem, em geral, uma competição entre fases magnética e de singletos de spin, além de levarem aos isolantes de Kondo[1, 2]. Para materiais não magnéticos, a presença de sítios magnéticos distribuídos em baixas concentrações pode mudar as propriedades do material puro. Além disso, tais imperfeições podem também favorecer a ocorrência de novas fases no sistema[3]. Considerando os casos limites, impureza Kondo (um sítio magnético) e rede de Kondo (sítios magnéticos em toda a rede), surge naturalmente o questionamento sobre como o sistema se comporta entre estas duas situações.

Avanços recentes em técnicas como o *scanning tunneling microscopy* possibilitam a manipulação individual de átomos magnéticos numa rede atômica, oferecendo assim uma perspectiva para o estudo experimental dos mais diversificados tipos de distribuição de tais impurezas numa rede não magnética[4]. Outra possibilidade é também o caso contrário, em que uma rede de Kondo periódica tem sítios magnéticos removidos ou substituídos por outros materiais sem caráter magnético. Para este último caso, existem trabalhos teóricos e experimentais, objetivando entender os efeitos que tais depleções podem ocasionar. Doniach e Fazekas[5] consideraram o efeito da substituição de pequenas quantidades de La,

não magnético, por Ce, em isolantes Kondo do tipo CeNiSn. Para pequenas dopagens, o sistema apresentava um estado fundamental antiferromagnético, enquanto que, em altas dopagens, sustentava caráter metálico e recuperava o estado desordenado magneticamente, dependendo do valor do acoplamento de *exchange* Kondo. Soliie e Schlottmann[6] estudaram o efeito da substituição de um único sítio magnético por um material não magnético, numa rede de Anderson, usando o termo *Kondo hole* para esta dopagem, verificando uma redução na coerência do estado fundamental do sistema de férmions pesados com o aumento da concentração de impurezas. Yu[7], também analisando tais regimes diluídos, estudou os efeitos de um *Kondo hole*, através do método de *density matrix renormalization group* (DMRG), numa rede de Kondo unidimensional, retirando um único sítio magnético. Entre outras características, Yu observou a mudança na localização da densidade de spin introduzida pela depleção em função do acoplamento Kondo  $J$ , observando um *crossover* entre os elétrons de condução e os sítios localizados. Schlottmann[8] estudou como a formação de uma banda de impureza gerada por uma concentração finita de *Kondo holes* poderia afetar tanto o ordenamento magnético como as propriedades de transporte numa rede de Anderson não degenerada. Além de verificar uma transição do caráter isolante para metálico como função da concentração das impurezas não magnéticas, para uma rede cúbica simples com *hopping* de primeiros vizinhos, Schlottmann observou um resultado semelhante àquele obtido por Doniach[5], em que o sistema passa por uma transição de uma fase não magnética para antiferromagnética e volta ao estado sem magnetização, partindo de baixas para altas concentrações das impurezas. Além disso, este também verificou a possibilidade de um ordenamento ferromagnético, embora os valores da interação de Coulomb,  $U$ , necessários fossem muito maiores do que aqueles capazes de sustentar uma fase antiferromagnética.

Os efeitos das impurezas foram também verificados experimentalmente. Materiais de composição  $CeMIn_5$ , com  $M=Rh, Co$  ou  $Ir$ , exibem antiferromagnetismo, supercondutividade ou coexistência entre ambos os ordenamentos, dependendo da pressão hidrostática externa ou do elemento  $M$ [9]. Utilizando o método de *nuclear magnetic resonance* (NMR), Urbano *et al*[9] estudaram o material  $CeCo(In_{1-x}Cd_x)_5$ , onde átomos de  $In$  foram substituídos por  $Cd$ . Substituindo 1% de  $In$  por  $Cd$  ( $x=0.01$ ), a temperatura crítica do estado supercondutor,  $T_c$ , reduz de  $T_c = 2.3K$  para  $T_c = 1.2K$  e induz a coexistência do ordenamento antiferromagnético de longo alcance em  $T_N = 2.8K$ . Para valores mais elevados da

concentração de dopagem,  $x$ , o estado supercondutor é completamente extinto, prevalecendo somente o estado Néel[3, 9]. Além disso, os resultados de NMR mostraram que a transição de fase é oriunda do surgimento de “ilhas” antiferromagnéticas nas redondezas dos sítios de Cd.

Mais recentemente, foi feito um estudo sobre como um único sítio não magnético é capaz de interferir na competição entre os estados singletos e o ordenamento antiferromagnético numa rede de Anderson periódica, utilizando o método de Monte Carlo Quântico (QMC)[10]. Considerando uma hibridização de natureza antiferromagnética na impureza e mantendo o sistema na condição de estado singlete, foram medidas a supressão das correlações dos estados singletos e as correlações antiferromagnéticas na região das impurezas, bem como a extensão do domínio resultante.

Fases condutoras e ordenamentos ferromagnéticos também podem surgir como consequência de depleções numa rede periódica. Assaad[11], utilizando o QMC, verificou a ocorrência de uma fase metálica numa rede de Kondo bidimensional, na qual três de cada quatro impurezas foram removidas de maneira regular. Titvinidze *et al*[4], abordaram os modelos de Kondo e Anderson em uma e duas dimensões, removendo metade dos sítios magnéticos de uma das sub-redes, pelos métodos de Hartree-Fock, DMFT e DMRG, discutindo possíveis mecanismos para ordenamento ferromagnético.

Nesta dissertação, fazemos um estudo do modelo de Anderson periódico bidimensional, nas mesmas condições abordadas no trabalho de Titvinidze *et al*[4], porém utilizando o método do *determinantal quantum monte carlo*. Um ordenamento ferromagnético foi observado analisado em termos das correlações existentes no sistema. No Capítulo 1, abordamos o modelo de Hubbard, como ponto de partida no estudo de sistemas correlacionados, apresentando alguns resultados rigorosos existentes e que podem ser estendidos para outras abordagens. No Capítulo 2, descrevemos os modelos de Kondo e de Anderson e discutimos algumas de suas propriedades no regime *half-filling* e em redes *bipartite*, que são úteis na discussão de nossos resultados. No Capítulo 3, apresentamos uma discussão sobre os efeitos de depleções nos modelos KLM e PAM. No Capítulo 4, descrevemos sucintamente o método de Monte Carlo que utilizamos no tratamento da rede de Anderson. No Capítulo 5 discutimos nossos resultados, fazendo uma breve comparação com aqueles obtidos na referência [4]. No capítulo 6, apresentamos nossas conclusões e perspectivas.

# Capítulo 1

## Modelo de Hubbard

### 1.1 Introdução

Na tentativa de compreender propriedades dos materiais em física da matéria condensada, muitos modelos foram desenvolvidos ao longo dos anos, desde abordagens clássicas, como o modelo de Drude, a quânticas, como as de Sommerfeld e *tight-binding*. Este último permitiu classificar uma quantidade enorme de sólidos cristalinos em condutores, semicondutores e isolantes. No entanto, a teoria de bandas apresentava inconsistências, prevendo que certos materiais isolantes deveriam ser condutores. O que havia de errado? Nem todos os elétrons de um metal atuam na condução: alguns pertencentes às camadas totalmente preenchidas estão fortemente ligados aos núcleos atômicos e são incapazes de se locomover na rede. Entretanto, a ocorrência de camadas semi-preenchidas resulta num comportamento eletrônico dividido entre a localização e a mobilidade num potencial periódico na rede. Isto faz com que não mais seja possível ignorar a interação entre elétrons em tais sistemas.

Tratando-se de magnetismo, também é possível vislumbrar como as propriedades magnéticas dos materiais são afetadas pela distribuição eletrônica. Em geral, elétrons situados nas camadas  $d$  ou  $f$  apresentam tendências à localização. Entretanto, a experiência mostra que, na série de transição do ferro, os elétrons  $d$  são, em grande parte, responsáveis pela condução. Já em elementos de terra-rara, os orbitais  $f$  são tão bem localizados que seu *overlap* é praticamente desprezível. O magnetismo observado ocorre devido a uma correlação entre estes últimos, mediada pelos elétrons da banda de condução. Estas são algumas das razões pelas quais qualquer teoria sensata sobre magnetismo em

metais não pode ignorar a itinerância eletrônica [13].

Vários modelos surgiram na tentativa de explicar tais fenômenos, entre eles o modelo de Hubbard. Para as propriedades elétricas, este foi bem sucedido, contemplando transição de Mott, que corrige as equivocadas previsões da teoria de bandas através de um balanço energético no sistema. A dupla ocupação num dado sítio aumenta a energia do sistema de uma quantidade  $U$ , devido à interação Coulombiana, ao passo que o *hopping* reduz esta de uma quantidade  $t$ . O estado do sistema, condutor ou isolante, é definido pela competição entre essas duas tendências. Neste capítulo descreveremos o modelo de Hubbard e alguns de seus resultados com o objetivo de compreender outros modelos similares.

## 1.2 Modelo de Hubbard

O modelo de Hubbard tem se mostrado útil no estudo das correlações eletrônicas. Contudo, em virtude da inexistência de soluções exatas em duas e três dimensões, suas propriedades ainda não são completamente compreendidas. Introduzido simultaneamente por Gutzwiller, Kanamori e Hubbard[14] como uma tentativa de compreender o magnetismo em metais de transição, este modelo oferece uma das mais simples maneiras de se investigar como interações entre elétrons podem originar, não apenas propriedades magnéticas, mas também isolantes e até mesmo supercondutoras. Diferentemente de Hamiltonianos de spins, o modelo de Hubbard não apresenta termos que possam, em princípio, favorecer o ordenamento magnético. A ideia por trás de sua formulação se apoia na possibilidade de se obter magnetismo através de um *interplay* entre as duas tendências opostas existentes: itinerância, definida pelo termo de bandas, e localização, definida pelo termo de Coulomb. Alguns resultados rigorosos confirmam esta hipótese, fazendo da formulação deste modelo um desafio na física teórica por resultar em magnetismo partindo de sistemas que não mostram tais interações explicitamente [15, 16, 17].

Em sua forma mais simples, o modelo de Hubbard é descrito por um Hamiltoniano do tipo

$$H = -t \sum_{\langle j,l \rangle} \sum_{\sigma} \left( c_{j\sigma}^{\dagger} c_{l\sigma} + \text{H.c.} \right) + U \sum_j n_{j\uparrow} n_{j\downarrow}, \quad (1.1)$$

onde  $c_{j\sigma}^\dagger$  ( $c_{i\sigma}$ ) é o operador de criação (aniquilação) de elétrons. O operador,  $n_{j\uparrow}$ , representa o número de ocupação de elétrons de spin  $\sigma$  no sítio  $i$ . Os termos  $t$  e  $U$  representam o custo energético do *hopping* e da interação Coulombiana, respectivamente. O termo de interação  $U$  é dado por

$$U = \int d\mathbf{r}_1 \int d\mathbf{r}_2 |\phi(\mathbf{r}_1 - \mathbf{R}_j)|^2 \frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} |\phi(\mathbf{r}_2 - \mathbf{R}_j)|^2, \quad (1.2)$$

onde  $\phi(\mathbf{r}_i - \mathbf{R}_j)$  representa a função de Wannier. No caso da Equação 1.1, o termo de interação aumenta a energia do sistema, de modo que  $U > 0$ . Contudo, o termo  $U$  também pode se apresentar em outra forma, não Coulombiana, de modo a ser menor do que zero (*vide eg* [18]). Para a primeira situação, o modelo de Hubbard é definido como repulsivo, enquanto na segunda, atrativo. É importante salientar que neste modelo a interação de Coulomb só é contabilizada quando os elétrons ocupam um mesmo sítio na rede.

Mostraremos agora que esse modelo tem se revelado eficiente no estudo do magnetismo, embora possa apresentar alguns resultados físicos incompatíveis, dependendo da abordagem utilizada. A Figura 1.1 mostra uma representação esquemática dos diagramas de fase do modelo de Hubbard para uma rede cúbica, em temperatura nula e no plano  $n - U/t$ , obtido de diferentes aproximações. Aqui,  $n$  é a densidade eletrônica e  $U/t$  é a razão entre as energias de interação e cinética, respectivamente. O limite infinito no eixo das ordenadas foi obtido com um artifício matemático e foi colocado apenas para permitir um melhor vislumbre do comportamento do sistema no intervalo  $0 \leq U/t \leq \infty$ . À esquerda, temos o resultado para a aproximação de *Hartree-Fock*. Vemos que, mesmo desprezando as correlações, o modelo é capaz de prever a ocorrência de fases ferro e anti-ferromagnéticas. É importante salientar também que o ordenamento ferromagnético surge para qualquer  $n$ , desde que  $U/t$  seja suficientemente forte. À direita, vemos o resultado de um método que inclui efeitos de correlação, mostrando uma redução nítida nas regiões de ordenamento. O ferromagnetismo deixa de existir em regimes de baixas densidades, de modo que uma fase paramagnética prevalece, mesmo no limite de  $U \rightarrow \infty$ . Isto mostra que as correlações são bastante relevantes para se caracterizar as fases em tais sistemas.

A Figura 1.2 mostra, novamente, uma comparação entre métodos diferentes utilizados na abordagem do modelo, mas agora em duas dimensões. À esquerda vemos o diagrama de fases para a aproximação de *Hartree-Fock*, com as mesmas dependências da Figura 1.1,

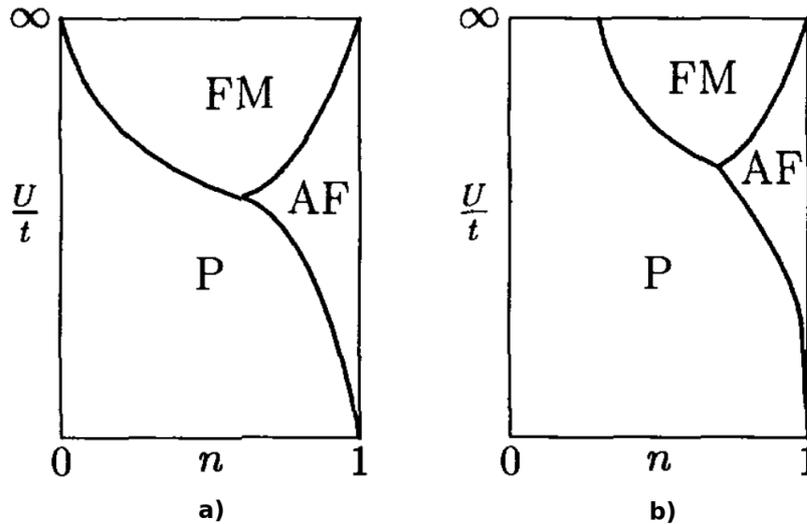


Figura 1.1: Resultados para o modelo de Hubbard de uma rede cúbica utilizando os métodos de *Hartree-Fock* (à esquerda) e um tratamento aproximado das correlações (à direita). Figura extraída da referência [18].

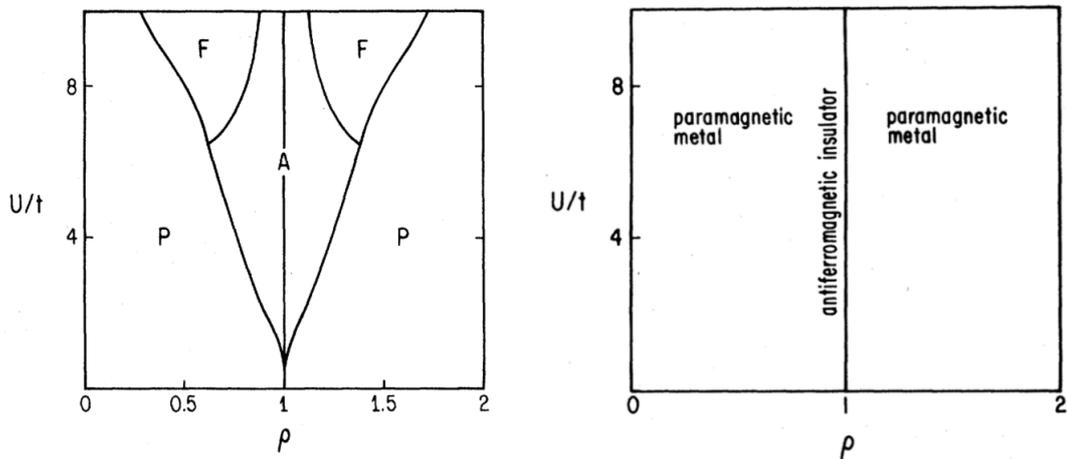


Figura 1.2: Resultados para o modelo de Hubbard, em duas dimensões, utilizando os métodos de *Hartree-Fock* (à esquerda) e Monte Carlo Quântico (à direita). Figura extraída da referência [43].

sendo  $\rho$  a densidade eletrônica. As três fases, paramagnética (P), antiferromagnética (A) e ferromagnética (F), apresentam regiões bem definidas. É interessante notar também como as variáveis  $\rho$  e  $U/t$  são relevantes. A fase antiferromagnética ocorre para qualquer valor de  $U/t > 0$ , desde que o sistema se mantenha no regime *half-filling*. Ao contrário, a fase ferromagnética, neste mesmo regime, ocorre somente para altos valores de interação. À direita, vemos o diagrama de fase para o mesmo sistema, obtido pelo método de Monte

Carlo Quântico (QMC). A diferença é nítida, mostrando uma total ausência de ferromagnetismo, mas a ocorrência de antiferromagnetismo continua situada nas dependências do regime *half-filling*, embora, de maneira muito mais restrita.

Abordaremos agora alguns resultados rigorosos do modelo de Hubbard, que oferecem possíveis rotas para o ordenamento magnético.

## 1.3 Alguns resultados rigorosos para o modelo de Hubbard

Como dito anteriormente, o modelo de Hubbard surgiu como uma tentativa de explicar ferromagnetismo em metais de transição. Este viés conduziu a resultados rigorosos para alguns parâmetros e redes específicas, bem como para algumas extensões do próprio modelo. Dentre estas restrições, enfatizamos o regime de preenchimento *half-filling* e as redes *bipartite*.

Os resultados apresentados a seguir mostram algumas possibilidades para a ocorrência do ferromagnetismo.

### 1.3.1 Teorema de Lieb

Em 1989, Lieb[21] provou um teorema sobre o modelo de Hubbard, com consequências tanto para o caso atrativo ( $U < 0$ ) quanto para o caso repulsivo ( $U > 0$ ), sendo o segundo, considerado ainda mais relevante. Este trabalho utiliza apenas o resultado do caso repulsivo, de modo que discutiremos aqui, brevemente, apenas este, bem como algumas de suas consequências. Para uma demonstração rigorosa, recomendamos o trabalho original de Lieb na referência[21].

Antes de definir o teorema, vamos revisar os conceitos de rede *bipartite* e regime *half-filling*.

- Rede *bipartite*:

Uma rede *bipartite* é aquela que pode ser decomposta naturalmente em duas sub-redes interpenetrantes de modo que todos os vizinhos próximos de uma sub-rede são membros da outra sub-rede. Assim, o termo de *hopping*,  $t_{i,j}$ , conecta um sítio  $i$  de uma sub-rede, por exemplo  $A$ , a um sítio  $j$  de outra sub-rede, por exemplo,  $B$ , mas não conecta sítios

da mesma sub-rede [13, 22]. A Figura 1.3 mostra uma representação ilustrativa de uma rede *bipartite*.

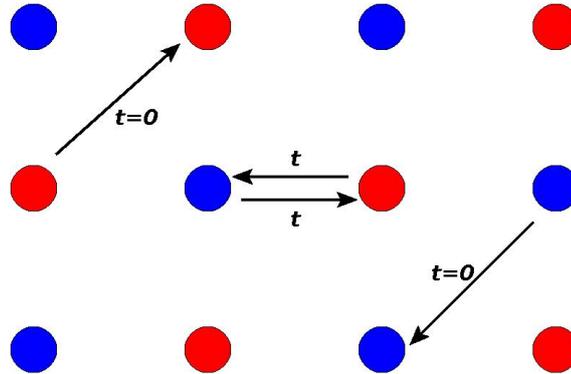


Figura 1.3: Ilustração de uma rede *bipartite*.

- Regime *half-filling*:

Na formulação do modelo de Hubbard, considera-se uma rede de núcleos atômicos onde existem elétrons distribuídos, transitando entre estes. Além disso, o orbital centrado em cada núcleo pode acomodar no máximo dois elétrons com spins opostos. Dessa forma, uma rede que apresenta  $N$  sítios nucleares pode agregar até  $2N$  elétrons. Assim, o regime *half-filling*, como o próprio nome sugere, é aquele no qual uma rede de átomos apresenta apenas metade da sua capacidade de ocupação eletrônica, ou seja,  $N$  sítios com  $N$  elétrons distribuídos.

Agora enunciamos o teorema de Lieb: considere uma rede *bipartite*, com sub-redes  $A$  e  $B$ . O número de sítios nas sub-redes é denotado por  $|A|$  e  $|B|$ ; estes podem ser diferentes. A energia de interação,  $U$ , é a mesma em toda a rede:  $U_i = U > 0$ . Então o teorema de Lieb diz que o estado fundamental para o modelo de Hubbard em *half-filling* ( $N = N_e$ ) é único e tem spin total  $S = (|A| - |B|)/2$  [18].

Quando o termo de interação,  $U$ , é forte, a natureza do estado fundamental torna-se clara devido ao mapeamento do modelo de Hubbard no modelo de Heisenberg antiferromagnético. O spin de um sítio da sub-rede  $A$  tende a alinhar-se anti-paralelamente com o spin dos sítios da sub-rede  $B$ . Desde que o número de sítios  $|A|$  e  $|B|$  é diferente, o completo alinhamento anti-paralelo da rede conduz ao spin total não nulo, apresentado no teorema de Lieb[18]. Em termos geométricos ( $|A| \neq |B|$ ) é comum o uso do termo ferrimagnetismo, que seria algo diferente do que se define como ferromagnetismo “verdadeiro”, em que todos os spins apresentam a mesma orientação devido a correlações entre

seus vizinhos. No caso de ( $|A| = |B|$ ), o teorema conduz a um estado singlete.

### 1.3.2 Alta densidade de estados eletrônicos

Até o momento, não falamos sobre como as propriedades do modelo de Hubbard respondem à estrutura de bandas do sistema. Contudo, estas podem também ser relevantes para um possível ordenamento magnético. Nesta seção, apresentamos uma noção qualitativa de como uma assimetria na densidade de estados do sistema pode favorecer ordenamento ferromagnético. Tal assimetria, que resulta numa alta densidade de estados eletrônicos acessíveis pode surgir, por exemplo, em redes que não são *bipartite*, como também pela frustração de redes *bipartite* devido ao *hopping* não nulo de segundos vizinhos.

O porquê de uma alta densidade de estados favorecer um ordenamento magnético é ilustrado na Figura 1.4.

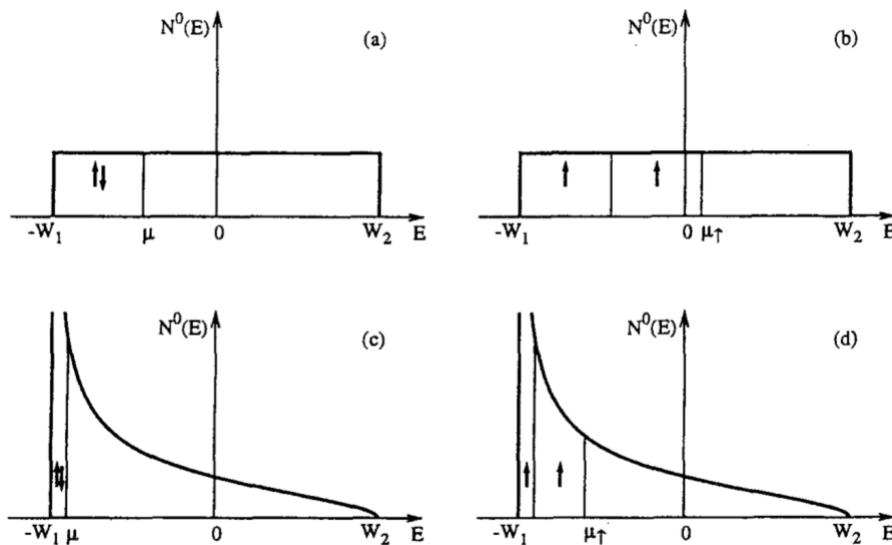


Figura 1.4: Redução do custo energético do *hopping* cinético em relação à dupla ocupação devido a presença de uma assimetria na densidade de estados eletrônicos. Figura extraída da referência [24].

As Figuras 1.4 a) e 1.4 b) representam uma densidade de estados simétrica e *flat*. Consideramos inicialmente o caso não-interagente,  $U=0$ . A Figura 1.4 a) representa o estado paramagnético. Na Figura 1.4 b) vemos o custo energético para se obter um estado totalmente polarizado, devido ao princípio da exclusão de Pauli. Comparando as variações de energia entre os dois estados, observa-se que o estado polarizado apresenta elevada energia em relação ao estado duplamente ocupado. Assim, o sistema é mais

estável mantendo a dupla ocupação no sítio. As Figuras 1.4 c) e 1.4 d) mostram o mesmo processo descrito para as Figuras 1.4 a) e 1.4 b), onde agora a densidade apresenta uma assimetria. No caso interagente,  $U \neq 0$ , surge uma competição entre as tendências de mobilidade e localização, de modo que o sistema busca a configuração de mais baixa energia. Devido a alta quantidade de estados disponíveis na banda assimétrica, o custo energético do *hopping* é reduzido, favorecendo assim um estado totalmente polarizado, em relação a densidade de estados simétrica.

Nos Capítulos 2 e 3 abordaremos os modelos de Kondo de Anderson, que também são úteis no estudo do magnetismo.

# Capítulo 2

## Modelo da rede de Kondo e Modelo de Anderson

### 2.1 Introdução

As propriedades dos sistemas correlacionados estão intimamente relacionadas com sua distribuição eletrônica, visto que os elétrons interagem diferentemente, dependendo dos níveis energéticos em que estão distribuídos. A presença de orbitais incompletos  $d$  e  $f$  é relevante, visto que seu caráter mais localizado conduz a efeitos de interação mais intensos do que em orbitais  $s$  e  $p$ . Desde que elétrons  $d$  e, principalmente,  $f$  mantêm o caráter iônico, estes hibridizam fracamente com os elétrons de condução. Como consequência, suas contribuições energéticas para interações elétron-elétron no mesmo sítio são bastante elevadas. [1, 25]

Embora fracamente acoplados com os níveis eletrônicos  $s$  e  $p$ , os elétrons  $d$  e  $f$  passaram a ser vistos como fonte de certos comportamentos incomuns nas propriedades de condução de muitos materiais, quando submetidos à baixas temperaturas. Em geral, o espalhamento inelástico da rede cristalina diminui com a redução da temperatura,  $T$ , atingindo um valor constante, quando  $T \rightarrow 0$ , como resultado das imperfeições na estrutura cristalina do material. Contudo, em alguns casos, a resistência apresentava um valor mínimo para determinadas temperaturas quando o material apresentava pequenas concentrações de metais de transição, sendo que o crescimento residual desta era proporcional à concentração destes metais e ocorria somente quando estes sustentavam caráter magnético [26]. Este fenômeno foi denominado efeito Kondo. A Figura 2.1 mostra a

resistência elétrica como função da temperatura para átomos de ferro diluídos em ligas de cobre. É possível ver claramente a mudança de regime da resistência entre as temperaturas de 20K e 40K, mostrando que o acoplamento eletrônico ocorre nestas faixas de energia, para este material.

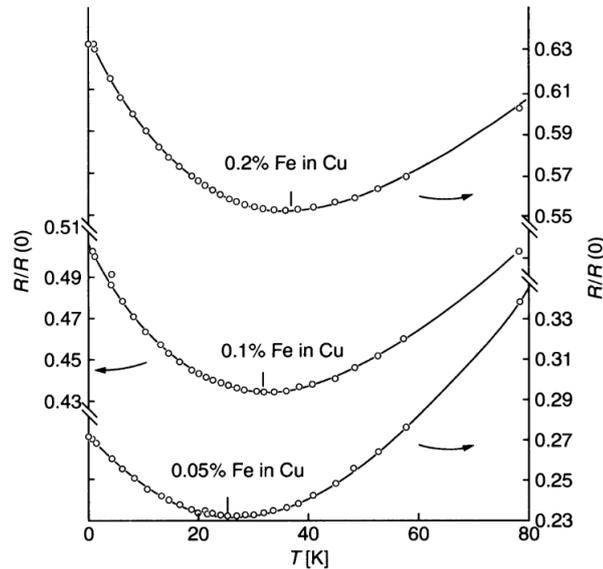


Figura 2.1: Resistência elétrica como função da temperatura para ligas magnéticas diluídas. Figura extraída da referência [13].

Em 1961, Anderson[25] propôs um modelo simples para estudar as dependências da formação de momentos magnéticos estáveis em íons de metais de transição, quando estes estavam presentes em redes não-magnéticas, identificando as interações entre elétrons localizados como o mecanismo responsável pelo fenômeno. Com as contribuições de Anderson, Kondo[26], que já enfrentava o problema do mínimo da resistência dos materiais desde 1934, compreendeu o fenômeno como um acoplamento entre os elétrons das impurezas magnéticas com a banda de condução, que tomava lugar quando a energia das flutuações térmicas eram da ordem de uma determinada temperatura, hoje conhecida como temperatura de Kondo  $T_K$ . Disto, em 1964, Kondo[27] apresentou o modelo que se conhece como Hamiltoniano da impureza de Kondo, que leva em conta apenas um orbital  $f$  na rede, fornecendo assim uma *picture* simples para explicar os dados experimentais[1]. Posteriormente, ambos os modelos de Kondo e Anderson foram ampliados para o que se conhece hoje como Modelo de Anderson Periódico (PAM) e Modelo da rede de Kondo (KLM). A seguir, discutiremos de maneira mais detalhada estes modelos, mostrando alguns resultados já consolidados, bem como as possibilidades que oferecem no estudo das

propriedades de sistemas magnéticos.

## 2.2 Hamiltoniano da impureza de Kondo

Kondo explicou o aumento da resistência com a diminuição da temperatura dos materiais com um modelo que levava em conta um acoplamento entre uma única impureza magnética e os elétrons da banda de condução. O Hamiltoniano pode ser descrito na forma

$$H = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \epsilon(\mathbf{k}) c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} + J \mathbf{S}_i^c \cdot \mathbf{S}, \quad (2.1)$$

onde o termo  $\mathbf{S}_i^c$  representa o spin dos elétrons da banda de condução e o termo  $\mathbf{S}$  representa o spin da impureza magnética. O termo  $J$  representa a energia de acoplamento existente entre os elétrons. Kondo observou que quando as ligas magnéticas eram submetidas à temperaturas da ordem de grandeza da energia do acoplamento  $J$ , os elétrons da banda de condução passavam a interagir com a impureza magnética de modo que um estado singleto era favorecido, blindando assim a magnetização da impureza. Esse efeito também é chamado de Kondo *screening*. Este modelo, embora capaz de descrever corretamente o crescimento da resistência elétrica das ligas magnéticas em baixas temperaturas, apresentava problemas no limite de  $T \rightarrow 0$ , resultando na previsão não-física de que a resistência tenderia a um valor infinito. Assim, os resultados podiam ser levados em conta somente acima de uma determinada temperatura, que ficou conhecida como temperatura de Kondo  $T_k$  [27].

## 2.3 Modelo da Rede de Kondo

Embora o efeito Kondo tenha sido capaz de explicar certos comportamentos inesperados nas propriedades de condução de alguns materiais, o modelo de ligas magnéticas diluídas não se mostrava eficiente para explicar o caráter de férmions pesados, que muitas vezes surgia em conjunto com a formação dos estados singletos. Assim, a ideia foi buscar uma versão do efeito Kondo atuando numa rede inteira, modelando tais sistemas de férmions através do que se definiu como modelo da rede de Kondo (KLM)[28].

Em sua forma mais simples, o modelo da rede de Kondo descreve uma rede de momentos magnéticos com spin-1/2, acoplados antiferromagneticamente, por um acoplamento  $J$ ,

aos elétrons da banda de condução. O Hamiltoniano é dado por

$$H_{\text{KLM}} = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \epsilon(\mathbf{k}) c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} + J \sum_{\mathbf{i}} \mathbf{S}_{\mathbf{i}}^c \cdot \mathbf{S}_{\mathbf{i}}^f, \quad (2.2)$$

onde o primeiro termo representa os elétrons de condução, com o operador  $c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger$  ( $c_{\mathbf{k}\sigma}$ ) representando a criação (aniquilação) de um elétron, com vetor de onda  $\mathbf{k}$  e spin  $\sigma = \uparrow, \downarrow$  no orbital estendido. Os graus de liberdade de spin-1/2, acoplados via  $J$ , são representados através das matrizes de spin de Pauli  $\sigma$ ,

$$\mathbf{S}_{\mathbf{i}}^c = \frac{1}{2} \sum_{ss'} \left( c_{\mathbf{i}s}^\dagger \sigma_{ss'} c_{\mathbf{i}s'} \right), \quad (2.3)$$

ou, de maneira equivalente, para  $\mathbf{S}_{\mathbf{i}}^f$ , usando os operadores orbitais de criação,  $f_{\mathbf{i}s}^\dagger$  e aniquilação,  $f_{\mathbf{i}s}$ .

O KLM apresenta duas escalas de energia que competem entre si, que têm como fonte o termo de *exchange*  $J$ , resultando em efeitos interessantes devido às correlações. Além da formação dos singletos Kondo, em 1966, Yosida[1] mostrou que o estado fundamental do KLM é descrito como um estado composto de spins localizados e polarizações de spin dos elétrons de condução. As dependências anômalas das grandezas físicas com a temperatura seriam consequência de um *crossover* partindo de um acoplamento fraco, em altas temperaturas, para um acoplamento forte, em baixas temperaturas. A escala de baixas energias é definida pela temperatura de Kondo  $T_K$ , em que ocorre a formação do estado singlete devido ao forte acoplamento entre os elétrons quando o termo de *exchange*  $J$  é intenso. Entretanto, no problema da rede, a polarização dos elétrons de condução na vizinhança de uma impureza pode atingir uma segunda impureza gerando assim um acoplamento entre estas: a interação de Ruderman-Kittel-Kasuya-Yosida (RKKY)[18, 13, 28], também conhecida como *indirect exchange*, por acoplar os sítios magnéticos indiretamente através da banda de condução, podendo sustentar ordenamento magnético. Esta escala de energia toma lugar para baixos valores do termo  $J$ .

A interação RKKY apresenta uma dependência relacionada às bandas de energia. A intensidade da polarização da banda de condução pelos elétrons localizados pode ser maximizada quando esta apresenta uma propriedade peculiar chamada de *nesting* da

superfície de Fermi. Para tal superfície, existe um número macroscópico de elétrons que podem ser deslocados para outro ponto da superfície de Fermi, portanto sem qualquer transferência de energia, pelo mesmo vetor de transferência de momento. A Figura 2.2 mostra um caso do KLM em regime *half-filling* que apresenta uma superfície de Fermi com *nesting*.

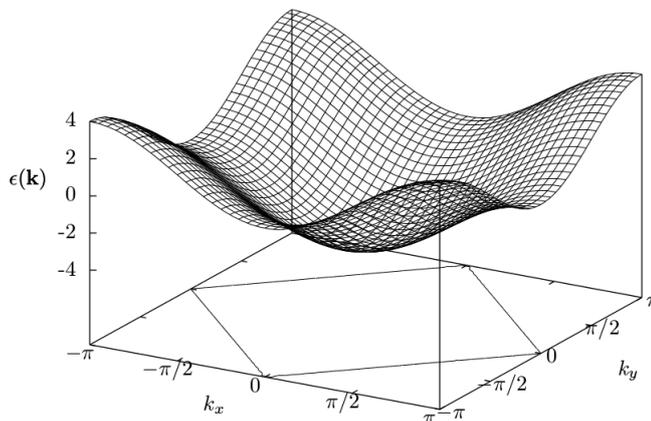


Figura 2.2: Relação de dispersão para os elétrons de condução e a superfície de Fermi em *half-filling* para o KLM. Figura extraída da referência [28].

Na Figura 2.3, temos somente a superfície de Fermi, exemplificando um dos possíveis vetores de translação do momento.

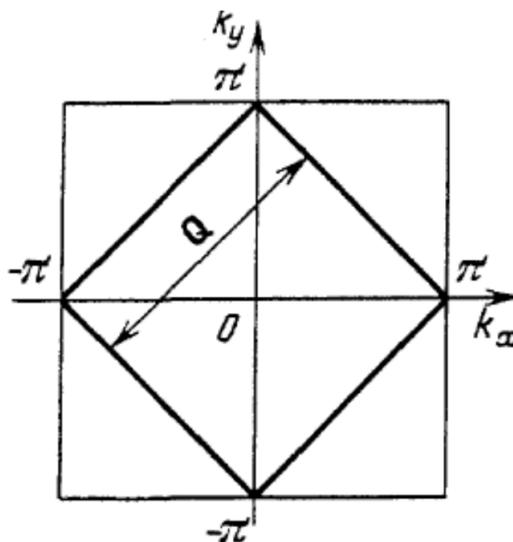


Figura 2.3: Superfície de Fermi *nested*. O vetor de onda  $Q$  desloca elétrons de um ponto da superfície para outro. Figura extraída da referência [29].

A presença de uma superfície de Fermi *nested* favorece o ordenamento magnético

da seguinte maneira: na tentativa de criar um singlete local, um spin localizado  $f$  tem de polarizar a superfície de Fermi em suas proximidades; o spin  $f$  seguinte “percebe” essa perturbação como um campo efetivo e responde a ela alinhando-se paralela ou anti-paralelamente com o outro spin localizado. Sendo assim, a banda de condução funciona como um meio transmissor da interação RKKY, dando origem ao ordenamento magnético. Assim, a eficiência do processo de ordenamento dependerá do quão a banda de condução é *suscetível* a esse efeito dos elétrons  $f$ [18]. A susceptibilidade dos elétrons de condução ao campo efetivo dos elétrons localizados é dada pela expressão

$$\chi(\mathbf{q}) = -\frac{2}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{n_F(\mathbf{e}(\mathbf{k})) - n_F(\mathbf{e}(\mathbf{k} + \mathbf{q}))}{\mathbf{e}(\mathbf{k}) - \mathbf{e}(\mathbf{k} + \mathbf{q})}, \quad (2.4)$$

onde  $n_F$  é a função de distribuição de Fermi-Dirac e  $\mathbf{e}(\mathbf{k})$  é a relação de dispersão dos elétrons de condução. Um momento localizado,  $f$ , num sítio  $j$  gera uma polarização que afeta um outro elétron  $f$  num sítio  $i$ , onde essa resposta é governada pela força do acoplamento  $J$ . A susceptibilidade no espaço real é dada por

$$\chi(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) = \sum_{\mathbf{q}} \chi(\mathbf{q}) e^{i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)}. \quad (2.5)$$

Como a interação RKKY depende dessa resposta da banda de condução, para algumas aproximações é possível mostrar que entre o acoplamento  $J_{\text{RKKY}}$  e a susceptibilidade à polarização dos elétrons de condução, existe uma dependência do tipo

$$J_{\text{RKKY}}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) \sim J^2 \chi(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j). \quad (2.6)$$

Desse modo, o máximo efeito do acoplamento RKKY, que conduz à uma configuração magnética estável, é determinado pelo máximo na susceptibilidade. Da Equação 2.4, é possível concluir que estes picos na susceptibilidade ocorrem para valores de  $\mathbf{q} = \mathbf{Q}$ , ou seja, para os vetores de onda de *nesting*[30].

Um exemplo explícito da forma que a interação RKKY pode tomar pode ser obtido considerando-se o caso simples da forma quadrática da banda de condução,  $\mathbf{e}(\mathbf{k}) = \frac{\mathbf{k}^2}{2m}$ , em três dimensões, que resulta na expressão[28]

$$J_{\text{RKKY}}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) \sim J^2 D(k_F) \frac{\cos(2k_F(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j))}{(k_F(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j))^3}, \quad (2.7)$$

onde  $k_F$  é o vetor de onda de Fermi e  $D(k_F)$  é a densidade de estados dos elétrons de condução no nível de Fermi. Esta expressão fornece um vislumbre do caráter oscilatório e da atuação de longo alcance da interação RKKY, desde que esta decai com uma lei de potência. A Figura 2.4 mostra uma representação desta interação, favorecendo o ordenamento antiferromagnético.

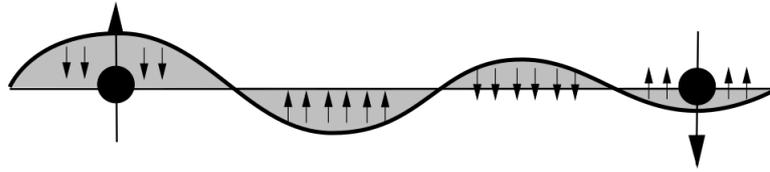


Figura 2.4: Dois elétrons localizados interagindo através da banda de condução pelo acoplamento RKKY. Figura extraída da referência [28].

Para o KLM, devido à competição entre os acoplamentos RKKY e o efeito Kondo, é possível verificar transições de fase analisando o acoplamento  $J$ . Além deste, parâmetros como a densidade eletrônica, dimensionalidade da rede e temperatura têm papel importante em tais transições. A Figura 2.5 mostra o diagrama de fase para o KLM obtido, pela aproximação de campo médio para uma rede de Kondo em três dimensões.

Para qualquer valor fixo de densidade eletrônica é possível perceber que a mudança do acoplamento  $J$  conduz a uma transição de fase magnética. Baixos valores de  $J$  favorecem, em geral, o ordenamento magnético pelo mecanismo RKKY, ao passo que o seu crescimento favorece a formação dos estados singletos, destruindo assim o ordenamento. É importante salientar que, na derivação do acoplamento RKKY, o efeito Kondo não é levado em conta e vice-versa. Assim, as fases do sistema são definidas por um *interplay* entre esses mecanismos. Este, por sua dependência de vários fatores, faz dessa competição o problema chave do KLM.

Embora o *interplay* entre as interações existentes no KLM torne difícil fazer previsões sobre as fases do sistema, alguns resultados consolidados a respeito do comportamento do modelo existem[1, 31]. Discutiremos brevemente entre estes, um de particular interesse para este trabalho, devido à sua conexão com o modelo de Hubbard e com a próxima seção, que trata do modelo de Anderson.

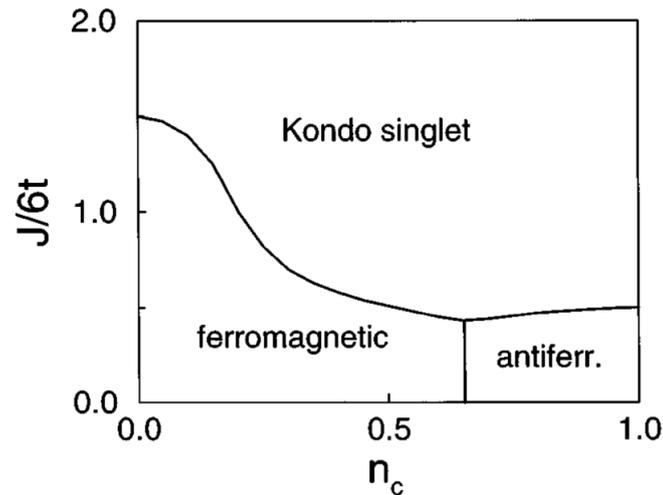


Figura 2.5: Diagrama de fase, densidade eletrônica vs o acoplamento Kondo, obtido pela aproximação de campo médio, para uma rede de Kondo em três dimensões. Figura extraída da referência [1].

## 2.4 KLM numa rede *bipartite* e em *half filling*

O KLM *half-filled* é considerado um modelo base para o estudo de isolantes Kondo. Nesta condição particular, tais compostos desenvolvem *gaps* de carga e de spin quando a temperatura é reduzida, o que indica que o estado fundamental é um singlete de spin. Além disso, a característica de rede *bipartite* também é relevante, visto que, em modelos como o de Hubbard[13], esta estrutura de rede, em conjunto com o preenchimento *half-filling*, resulta na simetria partícula-buraco, facilitando o tratamento de alguns problemas. Nesta próxima subseção, discutiremos brevemente algumas das consequências destas condições, abordadas nas referências [32] e [33]. A primeira, apresenta um resultado rigoroso para a ocorrência do estado singlete no modelo de Kondo, enquanto a segunda trata das correlações existentes entre os sítios da rede.

### 2.4.1 Resultados rigorosos para o KLM *half-filled*

No trabalho de Tsunetsugu[32], foram abordadas redes de Kondo *half-filled* e foi demonstrado que o estado fundamental de tais sistemas é único e é um singlete de spin. Além disso, foi obtida uma expressão para o spin total deste estado. Atentaremos aqui para a expressão do spin  $S_{\text{tot}}$ , que é o resultado mais relevante para este trabalho. O Hamiltoniano abordado tem a forma

$$\begin{aligned}
 H = \sum_{i,j,\sigma} t_{i,j} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + \frac{1}{2} \sum_j J_j^\perp \left( c_{j\uparrow}^\dagger c_{j\downarrow} f_{j\downarrow}^\dagger f_{j\uparrow} + \text{H.c.} \right) + \\
 + \frac{1}{4} \sum_j J_j^z \left( c_{j\uparrow}^\dagger c_{j\uparrow} - c_{j\downarrow}^\dagger c_{j\downarrow} \right) \left( f_{j\uparrow}^\dagger f_{j\uparrow} f_{j\downarrow}^\dagger f_{j\downarrow} \right),
 \end{aligned} \tag{2.8}$$

onde os operadores  $c_{i\sigma}^\dagger$  e  $c_{j\sigma}$  ( $f_{j\sigma}^\dagger$  e  $f_{j\sigma}$ ) representam os operadores de criação e aniquilação dos elétrons de condução (localizados), respectivamente. A rede de Kondo uniforme, com acoplamentos de *exchange* isotrópicos  $J_j^\perp = J_j^z$  e  $t_{ij} = t$ , é um caso particular da Equação 2.8. É importante salientar que os resultados mostrados a seguir, são válidos para quaisquer dimensões e que a única restrição necessária à rede é a propriedade *bipartite*.

A demonstração da unicidade do estado fundamental aqui tratada fez uso de uma abordagem chamada *spin-reflection-positivity method*, introduzida inicialmente por Lieb[34] na tentativa de reduzir as dificuldades no tratamento das funções de onda do estado fundamental dos elétrons itinerantes, que surgiam no modelo de Hubbard como consequência da anti-simetria das funções de onda fermiônicas. Ele provou que entre os estados fundamentais, existe pelo menos um que preserva uma simetria peculiar quando o Hamiltoniano apresenta duas características específicas[32]: primeiro, a conservação da componente  $z$  do spin total,  $S_{\text{tot}}^z$ , com a simetria de inversão de spin e, segundo, o termo de interação de dois corpos apresenta a forma

$$\sum_\mu g_\mu \left[ \widehat{V}_\mu^\uparrow \widehat{V}_\mu^\downarrow + (\widehat{V}_\mu^\uparrow)^\dagger (\widehat{V}_\mu^\downarrow)^\dagger \right]; g_\mu < 0 \quad \forall \mu, \tag{2.9}$$

onde  $\widehat{V}_\mu^\uparrow$  ( $\widehat{V}_\mu^\downarrow$ ) são operadores reais os quais contém somente operadores de spin-*up* (spin-*down*).

Partindo da Equação 2.8, e fazendo uso das condições acima citadas, Tsunetsugu mostrou a unicidade do estado fundamental. Após essa demonstração, o valor do spin total,  $S_{\text{tot}}$ , para o caso dos acoplamentos isotrópicos,  $J_j^\perp = J_j^z = J$  é dado por

$$S_{\text{tot}} = \frac{1}{2} \left| \sum_j (-1)^j (1 - \text{sgn} J_j) \right|. \tag{2.10}$$

Isto foi feito através de um mapeamento do modelo de Kondo no limite de  $|J_j| \rightarrow \infty$ , que resulta no modelo de Heisenberg antiferromagnético de spin-1/2, na mesma rede, dado pelo Hamiltoniano

$$H_s = \sum_{i \in A} \sum_{j \in B} \mathbf{S}_i^c \cdot \mathbf{S}_j^c + \sum_j J_j \mathbf{S}_j^c \cdot \mathbf{S}_j^f. \quad (2.11)$$

Para o cálculo do spin total, Tsunetsugu redefiniu os índices de sub-rede para os orbitais do tipo  $f$  separadamente daqueles relativos aos orbitais do tipo  $c$ , para ambos os Hamiltonianos dados nas Equações 2.8 e 2.11, de acordo com o sinal do acoplamento  $J_j$  (ou mais precisamente  $J_j^z$ ), seguindo a regra:

***Se um orbital  $f$  acopla com um orbital  $c$  ferromagneticamente ( $J_j^z < 0$ ), rotule o orbital  $f$  com o mesmo índice de sub-rede (A ou B) do orbital  $c$ . Se o acoplamento é antiferromagnético ( $J_j^z > 0$ ), rotule o orbital  $f$  com índice de sub-rede oposto.***

O spin total para o Hamiltoniano da Equação 2.11 é obtido pelo teorema de Lieb-Mattis, o qual estabelece que o modelo de Heisenberg antiferromagnético de spin-1/2, numa rede *bipartite* arbitrária, tem um estado fundamental singleto único se o número de sítios  $N_A$  da sub-rede A é igual ao número de sítios  $N_B$  da sub-rede B [4]. Para  $N_A > N_B$ , o teorema garante que o spin total é dado por

$$S_{\text{tot}} = \frac{1}{2} |\hat{N}_A - \hat{N}_B|. \quad (2.12)$$

Aqui, os termos  $\hat{N}_A$  e  $\hat{N}_B$  enfatizam o fato de que a contagem dos sítios nas sub-redes A e B foi feita pela regra já descrita. Através do mapeamento do modelo de Kondo-Heisenberg, Tsunetsugu demonstrou a equivalência entre as Equações 2.10 e 2.12.

Em se tratando de topologia, os resultados foram obtidos para redes em que a quantidade de orbitais de condução  $N_c$ , é a mesma dos orbitais localizados  $N_f$ . Esta condição pode, no entanto, ser relaxada, de modo que podemos ter  $N_c < N_f$  ou  $N_c > N_f$ , de modo que o sistema preserva o spin total do estado fundamental dado pela Equação 2.12. Isto abre um leque de possibilidades para o estudo de sistemas que apresentam depleções de sítios localizados, que é uma característica fundamental do modelo abordado neste trabalho.

Já para o ordenamento magnético, essas redes de Kondo generalizadas apresentam um estado fundamental ferromagnético se o spin total dado pela Equação 2.12, puder ser estendido ao limite termodinâmico, de modo que  $S_{\text{tot}} \propto L$ , onde  $L$  é o tamanho linear do sistema.

Um outro resultado rigoroso que enfatizamos aqui foi obtido por Shen[33], fazendo uso do método *spin-reflection-positivity* no tratamento do modelo de Kondo numa rede *bipartite* e em regime *half-filling*, com o objetivo de investigar o spin total e as correlações entre spins do sistema. O modelo da rede de Kondo abordado por Shen, é dado por

$$H = -t \sum_{\sigma, \langle i, j \rangle \in \Lambda_c} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + \sum_{i \in \Lambda_c} u_i \left( n_{c_{i\uparrow}} - \frac{1}{2} \right) \left( n_{c_{i\downarrow}} - \frac{1}{2} \right) + \sum_{i \in \Lambda_d} \left[ \frac{J^\perp}{2} (\mathbf{S}_{c_i}^+ \cdot \mathbf{S}_{d_i}^- + \mathbf{S}_{c_i}^- \cdot \mathbf{S}_{d_i}^+) + J_z (\mathbf{S}_{c_i}^z \cdot \mathbf{S}_{d_i}^z) \right], \quad (2.13)$$

onde  $c_{i\sigma}^\dagger$  ( $c_{i\sigma}$ ) são os operadores de criação (aniquilação) para os elétrons de condução (denotados por  $c$ ) e  $d_{i\sigma}^\dagger$  ( $d_{i\sigma}$ ) são os operadores de criação (aniquilação) para os elétrons localizados (denotados por  $d$ ).  $n_{c_{i\sigma}}$  e  $n_{d_{i\sigma}}$  são os operadores número para os elétrons  $c$  e  $d$ , com spin  $\sigma$  num sítio  $i$ , respectivamente.  $S_{c_i}$  e  $S_{d_i}$  são os operadores de spin para os elétrons  $c$  e  $d$ . Esse modelo é definido numa rede finita e *bipartite*  $\Lambda_c$ , a qual pode ser decomposta em duas sub-redes  $A$  e  $B$ , com  $N_A$  e  $N_B$  representando a quantidade de sítios em cada uma. O somatório nos termos de *hopping*,  $t$ , percorre todos os possíveis pares de sítios que são vizinhos próximos nas sub-redes.  $\Lambda_d$  denota a distribuição dos elétrons  $d$  na rede  $\Lambda_c$ , o qual é um subconjunto desta e os elétrons  $d$ 's estão distribuídos de modo que existem  $N_{Ad}$  destes na sub-rede  $A$  e  $N_{Bd}$  na sub-rede  $B$ . O único regime abordado foi o *half-filling*, de modo que  $N_e = N_A + N_B + N_{Ad} + N_{Bd}$ .

Shen demonstrou o seguinte teorema, que se aplica ao modelo de Kondo descrito na Equação 2.13, com ou sem o termo de Hubbard.

***Para um modelo de Kondo, numa rede bipartite e em half-filling, as correlações entre os spins no estado fundamental são dadas por***

$$\langle \Psi | \mathbf{S}_{c_i}^+ \cdot \mathbf{S}_{c_j}^- | \Psi \rangle = \epsilon(i)\epsilon(j)C_{ij},$$

$$\langle \Psi | \mathbf{S}_{d_i}^+ \cdot \mathbf{S}_{d_j}^- | \Psi \rangle = \epsilon(i)\epsilon(j)F_{ij}, \quad (2.14)$$

$$\langle \Psi | \mathbf{S}_{c_i}^+ \cdot \mathbf{S}_{d_j}^- | \Psi \rangle = -\epsilon(i)\epsilon(j) \frac{J_{\perp}}{|J_{\perp}|} G_{ij},$$

onde  $C_{ij}$ ,  $F_{ij}$  e  $G_{ij} \geq 0$  se todo  $U_i \geq 0$ , e  $> 0$  se todo  $U_i > 0$ . Os termos  $\epsilon$  são associados às diferentes sub-redes, de modo que  $\epsilon(i) = 1$ , quando  $i \in A$  e  $\epsilon(i) = -1$ , quando  $i \in B$ .

Este resultado mostra como as correlações entre os sítios se comportam, de acordo com a sub-rede às quais estes pertencem. Quando positivas, as expressões da Equação 2.14 indicam correlações ferromagnéticas e quando negativas, correlações antiferromagnéticas. As correlações entre elétrons  $c$  e  $d$ , num mesmo sítio, são então dadas por

$$\langle \Psi | \mathbf{S}_{c_i}^+ \cdot \mathbf{S}_{d_i}^- | \Psi \rangle = -\frac{J_{\perp}}{|J_{\perp}|} G_{ii}. \quad (2.15)$$

Logo, para  $J_{\perp} > 0$  as correlações são antiferromagnéticas, ao passo que  $J_{\perp} < 0$  resulta em correlações ferromagnéticas.

É importante enfatizar que embora tais resultados se apliquem apenas a modelos de elétrons localizados, espera-se que estes possam ser aplicados à rede de Anderson, que também é útil no estudo de sistemas de elétrons fortemente correlacionados. Isto se deve ao fato de que existe uma conexão entre os modelos de Kondo e de Anderson, o que pode possibilitar esta extensão.

## 2.5 Modelo de Anderson

### 2.5.1 Introdução

Analogamente ao modelo da impureza de Kondo, Anderson[25] desenvolveu uma abordagem para estudar as condições necessárias para a presença ou ausência de momentos localizados de íons solutos, contendo orbitais mais internos e em baixas concentrações, em metais que não apresentavam caráter magnético. Em sua forma mais simples, o modelo de Anderson apresenta um único momento localizado, com energia  $e_f$ , que pode tunelar quanticamente da impureza para a banda de condução, sendo descrito por um Hamiltoniano do tipo

$$\begin{aligned}
 H = -t \sum_{\langle j,l \rangle} \sum_{\sigma} \left( c_{j\sigma}^{\dagger} c_{l\sigma} + \text{H.c.} \right) + V \sum_{\sigma} \left( c_{j\sigma}^{\dagger} f_{\sigma} + f_{\sigma}^{\dagger} c_{j\sigma} \right) + \\
 + U f_{\uparrow}^{\dagger} f_{\uparrow} f_{\downarrow}^{\dagger} f_{\downarrow} + \sum_{\sigma} e_f f_{\sigma}^{\dagger} f_{\sigma},
 \end{aligned} \tag{2.16}$$

onde os operadores  $c_{j\sigma}^{\dagger}$  ( $c_{l\sigma}$ ) representam a criação (aniquilação) de elétrons de condução com spin  $\sigma = \uparrow, \downarrow$  e os operadores  $f_{\sigma}^{\dagger}$  e  $f_{\sigma}$  têm o mesmo significado, porém, para os elétrons da impureza magnética. De maneira semelhante ao Hamiltoniano de Hubbard, o primeiro termo representa os elétrons de condução e o termo de  $e_f$  representa a energia do elétron localizado. O termo de Coulomb contabiliza a energia da dupla ocupação para o momento localizado. O termo de  $V$  representa também um *hopping*, mas agora entre a banda de condução e o sítio da impureza.

Em se tratando do caráter magnético na rede, é interessante compreender em que condições o nível localizado apresenta ocupação de um elétron, em lugar de zero ou dois elétrons, e quando esse momento magnético localizado permanece livre, em vez de blindado pelas flutuações de spin dos elétrons de condução[35].

O caso em que o momento magnético pode surgir é ilustrado na Figura 2.6. Este ocorre quando a energia do estado localizado é menor que o nível de Fermi, sendo assim ocupado por pelo menos um elétron, enquanto a força de interação Coulombiana é intensa o suficiente para que a energia da dupla ocupação seja maior que a energia de Fermi, isto é,  $e_f < E_F < e_f + U$ . Em se tratando da liberdade do spin localizado, a situação passa a ser um pouco mais complicada, visto que os fatores responsáveis pelo isolamento ou interação destes momentos não são facilmente compreendidos por resultarem de competições entre interações.

Como no problema da impureza de Kondo, a extensão do modelo de Anderson com uma única impureza é o Modelo de Anderson Periódico (PAM), apresentado a seguir.

### 2.5.2 PAM

O PAM considera uma rede com um momento localizado por sítio. Assim, o Hamiltoniano é dado por

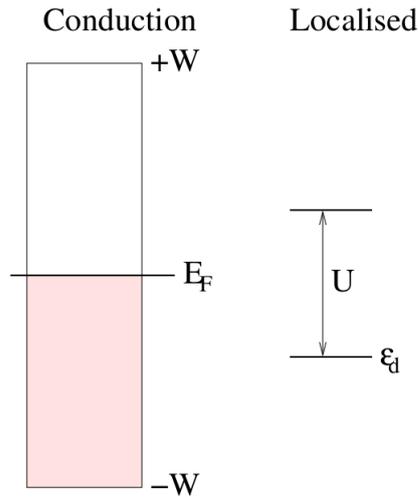


Figura 2.6: Esquema dos níveis de energia para as ocupações simples e duplas dos elétrons localizados, comparados com a banda de condução. Nesta figura, a energia  $\epsilon_d$  equivale a energia  $e_f$ , em nossa notação. Figura extraída da referência [35].

$$\begin{aligned}
 H_{\text{PAM}} = & -t \sum_{\langle j,l \rangle} \sum_{\sigma} \left( c_{j\sigma}^{\dagger} c_{l\sigma} + \text{H.c.} \right) + U \sum_j \eta_{j\uparrow}^f \eta_{j\downarrow}^f + \sum_j \sum_{\sigma} e_f \eta_{j\sigma}^f \\
 & + V \sum_j \sum_{\sigma} \left( c_{j\sigma}^{\dagger} f_{j\sigma} + f_{j\sigma}^{\dagger} c_{j\sigma} \right), \quad (2.17)
 \end{aligned}$$

onde operadores  $\eta_{j\sigma}^f$  representam o número de ocupação dos elétrons  $f$ , com spin  $\sigma = \uparrow, \downarrow$  e os operadores  $f_{j\sigma}^{\dagger}$  ( $f_{j\sigma}$ ) representam a criação (aniquilação) dos mesmos. O primeiro termo representa a energia dos elétrons livres na notação de segunda quantização, como descrito anteriormente. Os termos  $e_f$  e de Coulomb,  $U$ , contabilizam as energias de ocupação simples e dupla, dos orbitais  $f$  respectivamente. O último termo representa a hibridização entre os orbitais  $f$  e os elétrons de condução.

## 2.6 Relação entre o PAM e o KLM

Apesar das diferenças entre os modelos de Anderson e Kondo, existe uma situação em que é possível conectar ambos, fazendo com que o primeiro possa ser mapeado no segundo [35]. O KLM considera uma correlação entre elétrons localizados em orbitais  $f$  e a banda de condução, de maneira semelhante ao PAM. Este, entretanto, leva em conta a mobilidade dos elétrons  $f$  para a banda de condução, mediada pela hibridização  $V$ . Contudo, o que aconteceria se a intensidade dessa hibridização fosse reduzida, ou se a intensidade do termo

de Coulomb aumentasse? Para o PAM, o limite de  $U \rightarrow \infty$  faz com que a dupla ocupação dos orbitais  $f$  não mais ocorra, em função de seu alto custo energético para o sistema. Assim, estes orbitais apresentarão um único elétron por sítio, visto que suas energias  $\epsilon_f$  estão abaixo da energia de Fermi  $E_F$ , como mostrado na Figura 2.6. Este é, no entanto, o regime da rede de Kondo, em que os momentos estão localizados e interagem com a banda de condução. De maneira formal, é possível obter o KLM, em regime de baixo acoplamento Kondo, a partir do PAM pela transformação de Schrieffer-Wolff[35]. Dessa forma o acoplamento  $J$  de Kondo é relacionado aos parâmetros do PAM por  $J \propto V^2/U$ , mostrando que no limite de  $U$  intenso, o modelo de Anderson é equivalente ao KLM no regime de acoplamento fraco. A Figura 2.7 ilustra esse mapeamento.

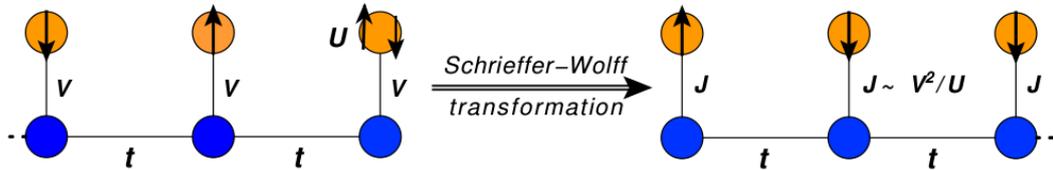


Figura 2.7: Ilustração do mapeamento do modelo de Anderson no modelo de Kondo através da transformação de Schrieffer-Wolff, em uma rede unidimensional.

Devido a essa conexão com o Modelo de Kondo, o Modelo de Anderson também exibe uma competição entre interações. Os termos de acoplamento Kondo,  $J$ , e RKKY,  $J_{\text{RKKY}}$  continuam a atuar na caracterização das fases do sistema. Este *interplay*, como no KLM, não é algo trivial, e agora apresenta também dependência com os termos de interação  $U$  e a hibridização  $V$ . A Figura 2.8 mostra o diagrama de fase para o PAM em regime *half filling* e em temperatura nula, para uma rede de Anderson bidimensional. Nesta figura é possível ver claramente a transição entre as fases magnética e não-magnética como função do acoplamento Kondo, que apresenta a dependência  $J \propto V^2/U$ . Assim, no regime de  $U$  forte e  $V$  fraco, temos o equivalente ao regime de  $J$  fraco, que corresponde à fase magneticamente ordenada, neste caso antiferro, que é direcionada pelo acoplamento RKKY. O caso contrário,  $U$  fraco e  $V$  forte, corresponde ao regime de  $J$  forte, favorecendo assim a formação de uma fase de singletos de spin.

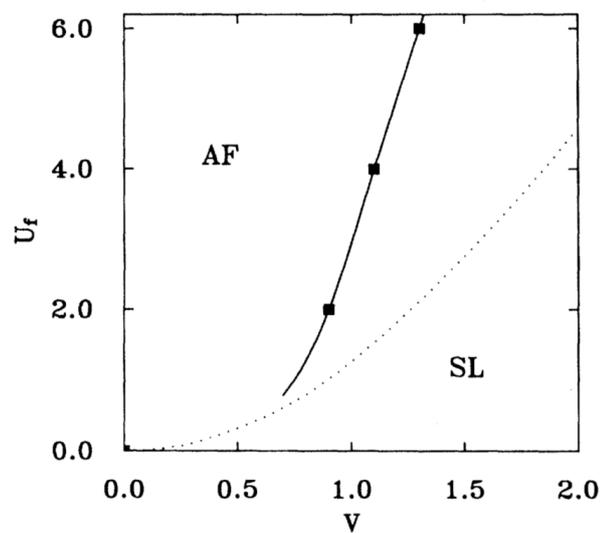


Figura 2.8: Diagrama de fase  $U_f - V$  para o PAM bidimensional, em regime *half filling* e em  $T = 0$ , mostrando o limite entre as fases antiferromagnética (AF) e *spin-liquid* (SL), resultantes da competição entre os acoplamentos RKKY,  $J_{\text{RKKY}}$ , e Kondo,  $J$ , respectivamente. A linha sólida foi obtida pelo método de Monte Carlo Quântico enquanto a linha pontilhada, pela aproximação de campo médio. Figura extraída da referência [2].

# Capítulo 3

## KLM e PAM com Depleção

### 3.1 Introdução

Neste capítulo abordamos o questionamento sobre como as propriedades de sistemas descritos pelos modelos KLM e PAM podem ser afetadas num regime intermediário entre a diluição dos sítios magnéticos (uma única impureza) e a completa distribuição destes na rede. Disto surgem os modelos de Anderson e Kondo com depleção, uma condição em que a quantidade de sítios magnéticos localizados passa a ser menor do que a de sítios de condução, porém ainda longe do regime diluído.

A extensão dos modelos KLM e PAM para redes com depleções vêm se mostrando útil, apresentando resultados novos, como no caso do surgimento de uma fase metálica numa rede de Kondo em duas dimensões, em que numa célula primitiva contendo quatro sítios magnéticos, três destes são removidas, de maneira regular[11]. Aqui, cada momento magnético ausente libera um elétron de condução, que de outra forma estaria vinculado ao momento localizado devido ao *Kondo screening*, no regime de acoplamento forte. Apesar da estabilidade dos estados singletos, que localizam os elétrons de condução, para uma depleção suficientemente *grande*, estes podem sofrer um *overlap* resultando num estado condutor. Em se tratando de ordenamento magnético, a interação RKKY continua desempenhando papel importante. Devido a avanços recentes em nanotecnologia, mais precisamente com o método chamado *scanning tunnelling microscopy* (STM)[4], atualmente é possível fazer um mapeamento tanto para a intensidade como para a dependência oscilatória com a distância da interação RKKY[4]. Além disso, o STM também possibilita a manipulação das posições de átomos magnéticos individuais através de uma superfície,

o que gera a possibilidade de se construir redes em que os sítios magnéticos podem ser posicionados de maneira regular[27, 4].

Neste capítulo, abordaremos de maneira breve os efeitos oriundos de depleções em redes de Kondo e de Anderson, mostrando como estas podem afetar a distribuição dos spins na rede e modificar o caráter das fases magnéticas do sistema. Na Seção 3.2 abordaremos alguns dos resultados de Yu[7] para uma rede de Kondo, considerando uma única impureza no sistema. Na Seção 3.3 apresentamos um dos resultados de Titvinidze *et al*[12], para redes de Kondo e de Anderson com depleções regulares.

### 3.2 *Kondo hole* no KLM

Considerando uma rede de Kondo em uma dimensão, apresentando apenas um sítio de condução sem impureza magnética (*Kondo hole*) e em regime *half-filling*, Yu[7], utilizando o método do DMRG, estudou, entre outras características, as mudanças na localização dos spins na rede. A Figura 3.1 ilustra o processo de depleção.

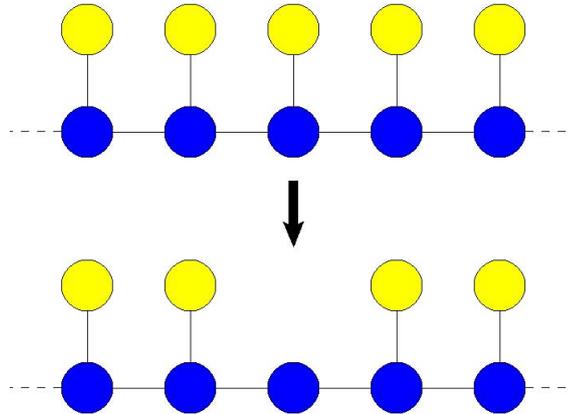


Figura 3.1: Depleção de uma rede de Kondo unidimensional. O sítio central, do qual foi removido o momento localizado, apresenta somente o elétron de condução, sendo assim chamado de *Kondo hole*.

O Hamiltoniano para esta rede mantém a forma

$$H_{\text{KLM}} = -t \sum_{i,\sigma} c_{i\sigma}^\dagger c_{i+1\sigma} + J \sum_i \mathbf{S}_i^c \cdot \mathbf{S}_i^f, \quad (3.1)$$

que representa o KLM em uma dimensão, mas agora com o momento localizado central nulo,  $\mathbf{S}_C^f = 0$ .

Em regime *half-filling*, a rede do KLM com um único *Kondo hole* apresenta um spin total  $S = 1/2$ . A distribuição deste na rede se mostra vinculada com a intensidade do acoplamento Kondo,  $J$ , que mantém o caráter competitivo entre os estados singletos e a interação RKKY. Assim, observamos comportamentos diferenciados para os regimes de acoplamento fraco e forte.

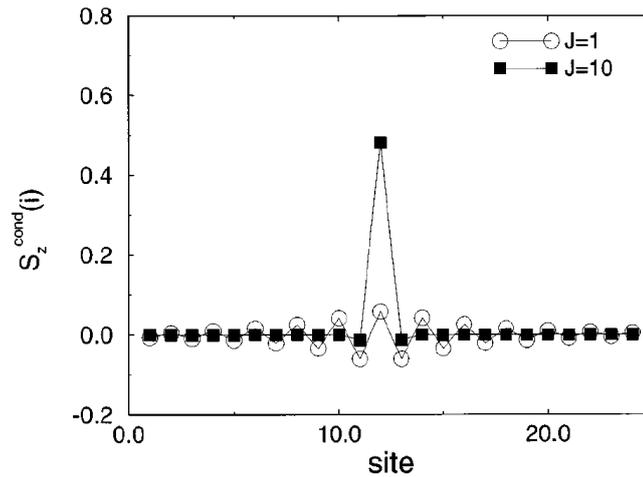


Figura 3.2: Componente z dos spins dos elétrons de condução em função da posição dos sítios da rede, para os valores do acoplamento de Kondo,  $J = 1$ , e  $J = 10$ , para uma rede de 24 sítios, em que o *Kondo hole* situa-se na posição  $i = 12$ . Figura extraída da referência [7].

A Figura 3.2 mostra a componente z dos spins dos elétrons de condução em função da posição dos sítios da rede, para os valores do acoplamento de Kondo,  $J = 1$ , e  $J = 10$ . Podemos observar que, no limite  $J \gg t$ , o *Kondo hole* tem um elétron localizado. Isto ocorre devido à formação dos estados singletos entre os momentos localizados e os elétrons de condução, de modo que o sítio com depleção acomoda o elétron que não forma singlete. Assim, o spin-1/2 reside no sítio de condução do *Kondo hole*. À medida que o acoplamento  $J$  decresce, o spin 1/2 vai transitando do sítio de condução para os sítios  $f$  localizados nas vizinhanças do *Kondo hole*. A Figura 3.3 mostra esta mudança na ocupação dos orbitais. Existe uma polarização na vizinhança do *Kondo hole*, mostrando o caráter antiferromagnético da interação RKKY e seu decaimento exponencial à medida que a distância entre os sítios  $f$  e a depleção cresce. Ambas as Figuras 3.2 e 3.3 mostram os valores da componente z do spin na rede para os valores limites do acoplamento  $J$  ( $J = 1$

e  $J = 10$ ), o que permite visualizar a mudança na localização do spin. Esta transição, entretanto, é contínua e isto pode ser percebido observando-se valores intermediários do acoplamento  $J$  para ambas as funções  $S_z^{\text{cond}}(\mathbf{i})$  e  $S_z^f(\mathbf{i})$ . A Figura 3.4 mostra esse *crossover* entre os orbitais de condução e aqueles localizados, onde  $S_z^{\text{cond}}(\mathbf{i})$  e  $S_z^f(\mathbf{i})$  representam os valores totais das componentes de spin de condução,  $\sum_i S_z^{\text{cond}}(\mathbf{i})$ , e dos spins localizados,  $\sum_i S_z^f(\mathbf{i})$ , respectivamente. Os símbolos preenchidos representam a diferença entre essas componentes de spin ( $S_z^f(\mathbf{i}) - S_z^{\text{cond}}(\mathbf{i})$ ). A transição de localização do spin pode ser vista claramente através do *crossover*, que ocorre nas proximidades de  $J \sim 4t$ , em que o *exchange* da interação RKKY passa a ser mais efetivo do que o *Kondo screening*, favorecendo assim a ocupação dos sítios  $f$  nas proximidades do *Kondo hole*, quando  $J$  diminui.

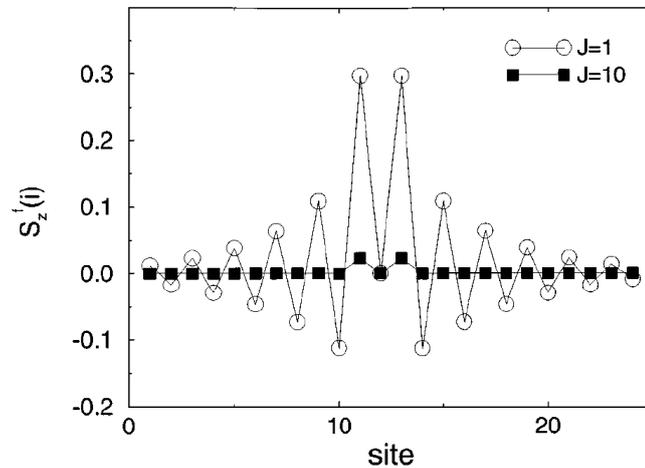


Figura 3.3: Componente  $z$  dos spins dos elétrons  $f$  em função da posição dos sítios da rede, para os valores do acoplamento de Kondo,  $J = 1$ , e  $J = 10$ , para uma rede de 24 sítios em que o *Kondo hole* situa-se na posição  $i = 12$ . Figura extraída da referência [7].

Os resultados abordados nesta seção mostram como uma única depleção é capaz de afetar a distribuição dos spins para uma rede de Kondo. O surgimento de correlações magnéticas nas proximidades do *Kondo hole* são ainda indícios da possibilidade de ordenamento magnético se a quantidade de depleções na rede cresce. Entretanto, o decaimento exponencial da interação RKKY com a distância do defeito sugere que um ordenamento magnético pode surgir se as depleções estiverem suficientemente próximas. Na seção seguinte apresentamos um resultado teórico para redes em tais condições.

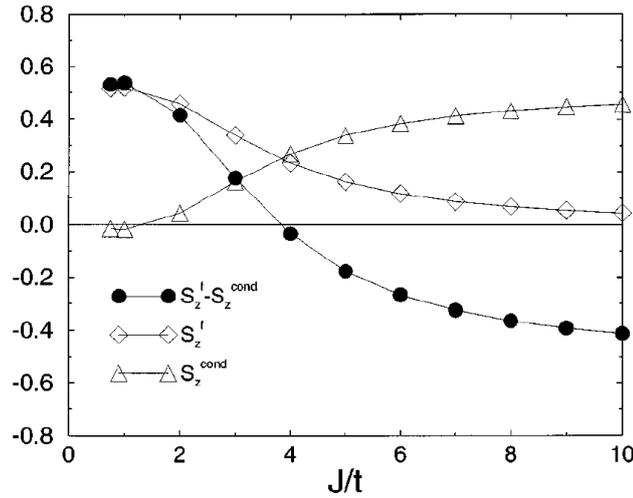


Figura 3.4: Spin total  $f$  [ $S_z^f(i) \equiv \sum S_z^f(i)$ ], spin total de condução [ $S_z^{\text{cond}}(i) \equiv \sum S_z^{\text{cond}}(i)$ ] e a diferença entre estes, em função de  $J/t$ , para uma rede de 24 sítios. Figura extraída da referência [7].

### 3.3 KLM e PAM com depleção regular

Nesta seção, abordaremos alguns dos resultados de Titvinidze *et al*[12], que consideram os modelos de Kondo e de Anderson, apresentando depleções regulares, de modo que a distância entre as impurezas magnéticas se mantém constante. A Figura 3.5 ilustra as redes consideradas, em uma dimensão.

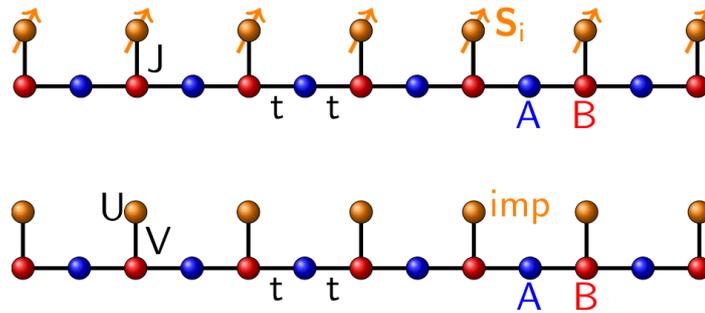


Figura 3.5: Ilustração para a rede de Kondo (acima) e de Anderson (abaixo), com depleções regulares, em uma dimensão.  $t$  é o *hopping* de primeiros vizinhos entre as sub-redes A e B. Os sítios em amarelo representam as impurezas magnéticas. No caso de Kondo, as impurezas são acopladas antiferromagneticamente pelo termo  $J$ . No caso de Anderson,  $V$  é a hibridização, e  $U$  é a interação de Coulomb. Figura extraída da referência [12].

Tratando-se perturbativamente o regime de acoplamento forte, tanto para o modelo de Kondo ( $J \gg t$ ) como para o modelo de Anderson ( $V \gg t$ ), este estudo mostrou[12] que

existe uma correlação de natureza ferromagnética entre os elétrons de condução da sub-rede  $A$ , agora em excesso devido as depleções na rede. A Figura 3.6 mostra o resultado para os momentos locais,  $\langle \mathbf{S}_i^2 \rangle$ , e para as correlações,  $\langle \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i'} \rangle$ , para diferentes sítios da sub-rede  $A$ , obtidos por DMRG. Esta figura mostra um comportamento similar para ambos os modelos. No regime RKKY, isto é,  $J \ll t$  e  $V \ll t$ , os momentos locais da sub-rede  $A$  são deslocalizados, visto que  $\langle \mathbf{S}_i^2 \rangle$  é pequeno, e os diferentes sítios  $A$ 's quase não apresentam correlações  $\langle \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i'} \approx 0 \rangle$ . Embora ausentes no gráfico, as correlações entre as impurezas magnéticas são fortes para valores de acoplamento  $J$  baixos. Com o crescimento do acoplamento  $J$ , tanto os momentos locais  $\langle \mathbf{S}_i^2 \rangle$  como as correlações entre os sítios  $A$ 's  $\langle \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i'} \rangle$  aumentam, tendendo aos valores máximos no limite do acoplamento forte  $J \gg t$  e  $V \gg t$ , mostrando a ocorrência de um *crossover* entre as impurezas e os sítios  $A$ 's e o surgimento de correlações ferromagnéticas entre os últimos.

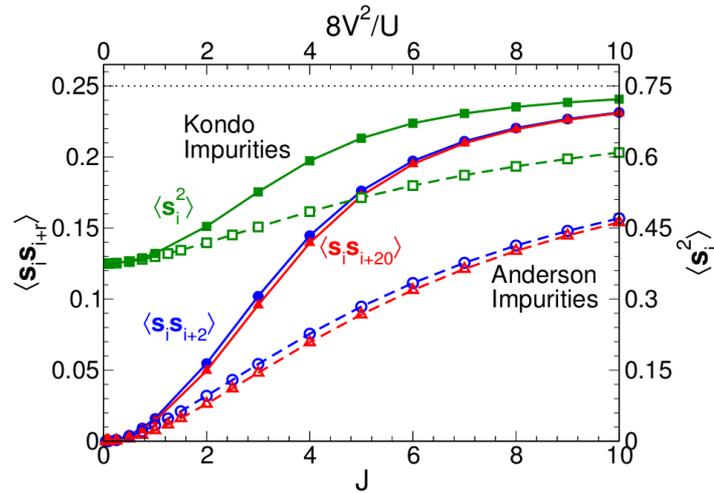


Figura 3.6: Momentos locais,  $\langle \mathbf{S}_i^2 \rangle$ , e correlações,  $\langle \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+1} \rangle$ , nos sítios da sub-rede  $A$ , obtidos por DMRG. Cálculo realizado para  $L = 49$  sítios de condução não-correlacionados e  $R = 25$  impurezas. Linhas sólidas com símbolos preenchidos: impurezas Kondo de spin-1/2. Linhas tracejadas com símbolos vazios: impurezas de Anderson. Resultados estão em função dos termos de acoplamento  $J$  e  $8V^2/U$ . Figura extraída da referência [12].

# Capítulo 4

## O método de Monte Carlo

### 4.1 Introdução

Entre as diversas abordagens numéricas existentes para tratar problemas de muitos corpos, enfatizamos o método de Monte Carlo, que resolve exatamente redes de tamanho finito. Enquanto que em métodos de diagonalização exata o tempo de cálculo computacional cresce exponencialmente com o tamanho da rede, os algoritmos de Monte Carlo são capazes de reduzir consideravelmente esse tempo. Para uma dimensão, existe um algoritmo em que o tempo de cálculo cresce linearmente com o tamanho da rede[43]. Em mais dimensões é possível conseguir uma dependência temporal cúbica, através da introdução de um campo de Ising independente do tempo juntamente com um algoritmo de atualização envolvendo funções de Green fermiônicas[36, 41, 43]. Este último é conhecido como *Determinantal Quantum Monte Carlo* (DQMC), e é o método que utilizamos para abordar nosso problema. Neste capítulo daremos uma breve descrição do método, partindo de sua construção inicial até a obtenção das funções que descrevem o comportamento do sistema físico tratado. Inicialmente abordaremos o método de Monte Carlo Clássico e em seguida, o Monte Carlo Quântico. Para mais detalhes, sugerimos o trabalho de R.R. dos Santos, *Introduction to Quantum Monte Carlo Simulations for Fermionic Systems*([36]), no qual nos baseamos para escrever este capítulo.

## 4.2 Monte Carlo Clássico

Em Mecânica Estatística, médias de grandezas físicas são obtidas a partir de uma soma sobre todas as configurações acessíveis ao sistema. Assim o valor médio de uma dada grandeza é obtido por

$$\langle A \rangle = \frac{\sum_{j=1}^M A(\mathbf{c}_j) e^{-\beta E(\mathbf{c}_j)}}{\sum_{j=1}^M e^{-\beta E(\mathbf{c}_j)}}, \quad (4.1)$$

onde  $E(\mathbf{c}_i)$  é a energia da  $i$ -ésima configuração,  $\mathbf{c}_i$ , e  $e^{-\beta E(\mathbf{c}_i)}$  é o respectivo peso probabilístico de Boltzmann. Entretanto, do ponto de vista físico, nem todas essas configurações são relevantes, visto que algumas delas serão apenas flutuações no sistema, por apresentarem altas energias. Assim, é mais viável, computacionalmente, considerar apenas um grupo específico de estados acessíveis e suas respectivas contribuições no cálculo das médias estatísticas. Este processo de seleção de estados é chamado de *importance sampling* (amostragem por importância), e é a base do método de Monte Carlo. Existem vários algoritmos eficientes na realização do *importance sampling*. Entre eles podemos citar o algoritmo de Metropolis[37], o qual gera, através de um processo Markoviano, uma cadeia de configurações mais prováveis na busca do equilíbrio termodinâmico. Para exemplificar o funcionamento do método, consideramos uma cadeia de spins descrita pelo Hamiltoniano de Ising, dado por

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i^z \sigma_j^z, \quad (4.2)$$

onde  $J$  é o acoplamento de *exchange* e  $\sigma_i^z = \pm 1$ . Partindo de um estado da rede de spin, tomado aleatoriamente, escolhemos um spin  $S_i$  e fazemos a mudança  $S_i \rightarrow -S_i$ . Se a diferença de energia após esse *flip*,  $\Delta E = E(-S_i) - E(S_i)$ , for negativa, aceitamos essa mudança em  $S_i$  e passamos ao sítio seguinte. Caso  $\Delta E > 0$ , a nova configuração é menos provável, mas ainda pode ser aceita com probabilidade  $r'$ , dada por  $e^{-\beta \Delta E}$ ; essa possibilidade simula o efeito das flutuações[38, 36]. Em ambos os casos, é importante notar o caráter *local* do processo de atualização de uma dada configuração isto é, o fato de um *flip* ser aceito não influencia o estado dos demais spins da rede.

Uma vez percorrida toda a rede, fazendo essas mudanças, usamos a configuração final de spin para calcular a média termodinâmica. É importante salientar que a configuração

aleatória com que se inicia a cadeia de Markov certamente não corresponde àquela de equilíbrio na temperatura de interesse, de modo que antes de calcular qualquer média, percorremos toda a rede muitas vezes, aceitando e rejeitando configurações até que o sistema entre em equilíbrio.

Quando o sistema atinge o equilíbrio, as médias podem ser medidas. Suponha que ao final de um  $j$ -ésimo processo de mudança do spin, obtemos um valor  $A_j$  para a quantidade  $A$ . Portanto, após  $N_a$  processos, é natural definir a média termodinâmica como[36]

$$\langle A \rangle = \frac{1}{N_a} \sum_{j=1}^{N_a} A_j. \quad (4.3)$$

A simplicidade desta abordagem não pode, no entanto, ser aplicada a sistemas que apresentam efeitos quânticos de correlações fortes. Apesar disso, a estrutura do Monte Carlo Clássico pode ainda ser utilizada como uma base para o tratamento de tais problemas. Disto surge o método de Monte Carlo Quântico, apresentado na próxima seção.

### 4.3 Monte Carlo Quântico

No modelo de Ising, a abordagem é simplificada pelo fato de os autoestados do Hamiltoniano serem dados pelos produtos de estados de partículas simples. Os efeitos quânticos manifestam-se como resultado da não comutação dos termos do Hamiltoniano abordado[36]. Diferentemente do modelo de Ising, Hamiltonianos de elétrons interagentes apresentam tais características, o que dificulta o seu tratamento. O modelo de Hubbard, por exemplo, exhibe tal propriedade tanto nos termos bilineares, como nos termos de interação, que são quárticos. Os primeiros são facilmente diagonalizáveis, mas não os últimos. O método de Monte Carlo Quântico é uma abordagem adequada para lidar com os termos de interação de um Hamiltoniano de elétrons interagentes. Devido à enorme gama de problemas existentes na Mecânica Quântica e Estatística, este método apresenta muitas variações, o que aumenta a amplitude de sua aplicação. Entre estas, podemos citar o *Path Integral Monte Carlo*[39], *Variational Monte Carlo method*[40], *Diffusion Monte Carlo method*[40], entre outras. Nesta seção, abordaremos outra destas variações: o *Determinantal Quantum Monte Carlo*. Diferentemente do Monte Carlo Clássico cuja ação é local e cujo tempo de atualização por grau de liberdade é independente do tamanho da

rede, a ação das funções fermiônicas neste método é não local. Assim, o *update* de uma das variáveis posicionais de rede toma um tempo de cálculo computacional que cresce com o quadrado do tamanho da rede[42].

Agora, faremos uma breve discussão da estrutura do método, a partir das referências [36, 42]. Tomando o modelo Hubbard como exemplo de aplicação, geralmente estamos interessados em grandezas do tipo

$$\langle A \rangle = Z^{-1} \text{Tr}[Ae^{-\beta H}], \quad (4.4)$$

onde  $Z = \text{Tr}[e^{-\beta H}]$  representa a função de partição do sistema e  $\text{Tr}$ , o traço dos operadores em questão. O processo de diagonalização exata inclui a construção explícita da matriz  $H$  no formalismo de número de ocupação, o que permite o cálculo do traço. Tal procedimento só é possível se os operadores se apresentarem em formas quadráticas. Partindo dessa suposição, temos

$$H = \begin{bmatrix} c_{1,\sigma}^\dagger & c_{2,\sigma}^\dagger & \cdot & \cdot \end{bmatrix} \begin{bmatrix} h_{11} & h_{12} & \cdot & \cdot \\ h_{21} & h_{22} & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_{1,\sigma} \\ c_{2,\sigma} \\ \cdot \\ \cdot \end{bmatrix}, \quad (4.5)$$

onde  $h$  é uma matriz  $N \times N$ , com  $N$  representando o número de sítios do sistema. Assim, o traço do operador  $H$  é dado por

$$Z = \text{Tr}[e^{-\beta H}] = \det[I + e^{-\beta h}], \quad (4.6)$$

onde  $\det$  representa um determinante usual de uma matriz  $N \times N$  e  $I$  é a matriz identidade  $N$ -dimensional.

A Equação 4.6 é facilmente verificada considerando-se os graus de liberdade de um único férmion, com Hamiltoniano dado por  $H = \epsilon c^\dagger c$ , de modo que a função de partição é dada por

$$Z = \langle 0|e^{-\beta \epsilon c^\dagger c}|0 \rangle + \langle 1|e^{-\beta \epsilon c^\dagger c}|1 \rangle = 1 + e^{-\beta \epsilon}. \quad (4.7)$$

De maneira mais geral, a Equação 4.6 pode ser verificada fazendo uso da base que diagonaliza  $\mathbf{h}$ . Existe ainda uma forma mais geral para esta equação. Considerando um conjunto de formas quadráticas  $l = 1, 2, \dots, L$ , a Equação 4.5 pode ser escrita como

$$H(l) = \begin{bmatrix} c_{1,\sigma}^\dagger & c_{2,\sigma}^\dagger & \cdot & \cdot \end{bmatrix} \begin{bmatrix} h(l)_{11} & h(l)_{12} & \cdot & \cdot \\ h(l)_{21} & h(l)_{22} & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_{1,\sigma} \\ c_{2,\sigma} \\ \cdot \\ \cdot \end{bmatrix}, \quad (4.8)$$

e a função de partição é dada por

$$Z = \text{Tr}[e^{-\beta H(1)} e^{-\beta H(2)} \dots e^{-\beta H(L)}] = \det[\mathbf{I} + e^{-\beta h(1)} e^{-\beta h(2)} \dots e^{-\beta h(L)}], \quad (4.9)$$

possibilitando assim o cálculo da função de partição para sistemas cujo Hamiltoniano apresenta apenas operadores quadráticos[42].

O Hamiltoniano de Hubbard é definido por

$$H = -t \sum_{\langle j,l \rangle} \sum_{\sigma} \left( c_{j\sigma}^\dagger c_{l\sigma} + \text{H.c.} \right) + u \sum_j \eta_{j\uparrow} \eta_{j\downarrow}, \quad (4.10)$$

onde os operadores  $c$ 's representam os elétrons móveis na banda de condução enquanto os operadores  $\eta$ 's representam o número de ocupação dos elétrons localizados. Os últimos são dados explicitamente por  $\eta_{j\sigma} = c_{j\sigma}^\dagger c_{j\sigma}$ , de modo que o Hamiltoniano torna-se

$$H = -t \sum_{\langle j,l \rangle} \sum_{\sigma} \left( c_{j\sigma}^\dagger c_{l\sigma} + \text{H.c.} \right) + u \sum_j c_{j\uparrow}^\dagger c_{j\uparrow} c_{j\downarrow}^\dagger c_{j\downarrow}. \quad (4.11)$$

O método de diagonalização descrito acima é capaz resolver apenas o primeiro termo de Hubbard, que é bilinear em operadores fermiônicos. O segundo, por ser quártico, não poder ser abordado da mesma forma. Para lidar com esse problema fazemos uso de alguns artifícios matemáticos. Seja o Hamiltoniano dado por  $H = K + V$ , onde  $K$  e  $V$  representam os termos bilineares e quárticos, respectivamente. A função de partição fica

$$Z = \text{Tr}[e^{-\beta H}] = Z = \text{Tr}[e^{-\beta(K+V)}]. \quad (4.12)$$

A ideia inicial é separar a exponencial em termos individuais de  $\mathbf{K}$  e  $\mathbf{V}$ . Para isso, partimos da expressão

$$e^{-\beta(\mathbf{K}+\mathbf{V})} = e^{-\beta\mathbf{K}}e^{-\beta\mathbf{V}} + \mathcal{O}[(\beta)^2] [\mathbf{K}, \mathbf{V}], \quad (4.13)$$

de modo que, até a primeira ordem, teríamos  $e^{-\beta(\mathbf{K}+\mathbf{V})}$ . Embora a aproximação seja tentadora, não se pode garantir, *a priori*, que aplicações sucessivas desse processo não levem a um resultado tendencioso devido a erros cumulativos. Na tentativa de evitar tal problema, introduzimos um pequeno parâmetro,  $\Delta\tau$ , através de  $\beta = M\Delta\tau$  e aplicamos a fórmula de Suzuki-Trotter[36]

$$e^{-\beta(\mathbf{K}+\mathbf{V})} = (e^{-(\Delta\tau\mathbf{K}+\Delta\tau\mathbf{V})})^M = (e^{-\Delta\tau\mathbf{K}}e^{-\Delta\tau\mathbf{V}})^M + \mathcal{O}[(\Delta\tau)^2] [\mathbf{K}, \mathbf{V}], \quad (4.14)$$

de modo que teríamos um resultado exato no limite de  $M \rightarrow \infty$ ,

$$e^{-\beta(\mathbf{K}+\mathbf{V})} = \lim_{M \rightarrow \infty} (e^{-\Delta\tau\mathbf{K}}e^{-\Delta\tau\mathbf{V}})^M. \quad (4.15)$$

A analogia com a formulação de integrais de caminho para a Mecânica Quântica sugere que o processo acima considera um intervalo de tempo imaginário,  $(0, \beta)$ , sendo discretizado em  $M$  fatias, separadas por um intervalo  $\Delta\tau$ [36].

O fato de que  $M$  é finito implica o mesmo para  $\Delta\tau$ , fazendo deste fonte de erros sistemáticos. Tais erros podem ser reduzidos aumentando o valor de  $M$  e extrapolando os resultados para  $\Delta\tau \rightarrow 0$ . Fixando a temperatura,  $\beta$ , é comum definir  $\Delta\tau = \sqrt{0.125/\mathbf{U}}$  e escolher  $M = \beta/\Delta\tau$ .

Após a separação das exponenciais, os termos quárticos em  $\mathbf{V}$  podem ser abordados. Nesse ponto, transformaremos os termos quárticos em bilineares, utilizando a transformação de Hubbard-Stratonovich (HS)[44], dada por

$$e^{\frac{1}{2}\mathbf{A}^2} \equiv \sqrt{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-\frac{1}{2}x^2 - x\mathbf{A}}. \quad (4.16)$$

Esta substitui a exponencial do quadrado de um operador pela exponencial do próprio, com o custo da introdução de um grau de liberdade auxiliar (campo)  $x$ , o qual acopla linearmente com o operador original  $\mathbf{A}$ . Entretanto, no tratamento computacional é mais

conveniente lidar com variáveis discretas. Assim, o campo auxiliar  $\mathbf{x}$  é substituído por uma variável  $S$ , definida como um campo de Ising. Disto, a transformação HS, aplicada em sua forma discreta ao termo quártico do Hamiltoniano, assume a forma

$$e^{-u\Delta\tau(n_{\uparrow}-\frac{1}{2})(n_{\downarrow}-\frac{1}{2})} = \frac{1}{2}e^{-\frac{u\Delta\tau}{4}} \sum_S e^{\lambda S(n_{\uparrow}-n_{\downarrow})}, \quad (4.17)$$

onde  $\cosh\lambda = e^{u\Delta\tau/2}$  e  $S = \pm 1$  é a variável de Ising. De posse disto e da fórmula de Suzuki-Trotter, voltamos à expressão para o cálculo da função de partição, que torna-se

$$Z = \text{Tr}[e^{-\beta H}] = \text{Tr}[e^{-\Delta\tau K} e^{-\Delta\tau V} e^{-\Delta\tau K} e^{-\Delta\tau V} \dots]. \quad (4.18)$$

Os termos  $e^{-\Delta\tau K}$  são quadráticos nos operadores fermiônicos, não apresentando problemas na diagonalização. Para cada um dos  $M$  termos quárticos,  $e^{-\Delta\tau V}$ , introduzimos  $N$  campos HS, um para cada sítio espacial, desacoplando os termos de interação *on-site*. O campo HS, agora representado por  $S(\mathbf{i}, \mathbf{l})$ , apresenta portanto dois índices; um associado à mudança espacial ( $\mathbf{i}$ ) e outro associado ao tempo imaginário ( $\mathbf{l}$ ). Assim, os operadores  $e^{-\Delta\tau V(\mathbf{l})}$  são agora quadráticos nos operadores fermiônicos. O índice  $\mathbf{l}$  nos termos  $V(\mathbf{l})$  enfatizam que para cada tempo imaginário, estes apresentam campos HS diferentes[42].

Aplicando as expressões apresentadas anteriormente, a função de partição é dada na forma

$$Z = \sum_{S(\mathbf{i}, \mathbf{l})} \det M_{\uparrow} \det M_{\downarrow}, \quad (4.19)$$

onde temos um produto de determinantes, um para cada orientação possível de spin. A dependência dos índices  $\mathbf{i}, \mathbf{l}$ , nos termos  $M_{\sigma}$ , é mostrada nas equações subsequentes. Logo, a função de partição é agora expressa para um problema de Monte Carlo clássico: é necessário fazer uma soma sobre as possíveis configurações das variáveis reais clássicas,  $S(\mathbf{i}, \mathbf{l})$ , com os respectivos “pesos de Boltzmann” dados pela Equação 4.19. Isto é o que equivale ao *importance sampling* no DQMC.

Para o modelo de Hubbard unidimensional, as matrizes  $M$ , são dadas explicitamente na forma

$$M_{\sigma} = I + e^{-k} e^{-v_{\sigma}(1)} e^{-k} e^{-v_{\sigma}(2)} \dots e^{-k} e^{-v_{\sigma}(L)}, \quad (4.20)$$

onde

$$k = -\Delta\tau \begin{bmatrix} \mu & t & 0 & 0 & \cdot & \cdot \\ t & \mu & t & 0 & \cdot & \cdot \\ 0 & t & \mu & t & \cdot & \cdot \\ 0 & 0 & t & \mu & \cdot & \cdot \end{bmatrix}, \quad (4.21)$$

e

$$v_\sigma(\mathbf{l}) = \lambda_\sigma \begin{bmatrix} S(1, \mathbf{l}) & 0 & 0 & 0 & \cdot & \cdot \\ 0 & S(2, \mathbf{l}) & 0 & 0 & \cdot & \cdot \\ 0 & 0 & S(3, \mathbf{l}) & 0 & \cdot & \cdot \\ 0 & 0 & 0 & S(4, \mathbf{l}) & \cdot & \cdot \end{bmatrix}. \quad (4.22)$$

De maneira geral, o algoritmo para o DQMC pode ser descrito pelas seguintes etapas:

- (a) Inicializar todas as variáveis de Hubbard-Stratonovich.
- (b) Calcular as matrizes  $M_\sigma$  e seus determinantes.
- (c) Mudar um ou mais dos campos de Hubbard-Stratonovich e calcular suas novas matrizes  $M'_\sigma$  e seus determinantes.
- (d) Tomar um número aleatório,  $0 < r < 1$ , e “aceitar” a nova configuração com probabilidade  $\min(1, \det M / \det M')$ , como usual no algoritmo de Metropolis.

### 4.3.1 Medidas das grandezas físicas

Agora apresentamos o procedimento para a obtenção das grandezas físicas. Para dois operadores  $A$  e  $B$ , a função de correlação para um mesmo “tempo” é dada por

$$\langle AB \rangle = \frac{1}{Z} \text{Tr}_{(s)} \text{Tr} \left[ AB \prod_{\mathbf{l}\sigma} e^{-\Delta\tau K} e^{-\Delta\tau V^\sigma(\mathbf{l})} \right]. \quad (4.23)$$

Se definirmos agora a média fermiônica (função de Green) para uma dada configuração do campo HS como

$$\langle AB \rangle_{(s)} = \frac{1}{\rho(s)} \text{Tr} \left[ AB \prod_{\mathbf{l}\sigma} e^{-\Delta\tau K} e^{-\Delta\tau V^\sigma(\mathbf{l})} \right], \quad (4.24)$$

onde  $\rho(s) = \det M_\uparrow(s) \det M_\downarrow(s)$ , a função de correlação torna-se

$$\langle AB \rangle = \frac{1}{Z} \text{Tr}_{(s)} \langle AB \rangle_{(s)} \rho(s). \quad (4.25)$$

A Equação 4.27 mostra que o valor médio de um operador é obtido tomando-se as correspondentes funções de Green das configurações de HS, “pesadas” por  $\rho(s)$ [36]. Assim, um produto de determinantes funciona como um peso probabilístico na amostragem das variáveis geradas pelas transformações HS.

Utilizando as funções de Green, é possível calcular várias grandezas físicas de interesse, visto que estas podem ser definidas no formalismo do número de ocupação. Entre elas, podemos citar as componentes do operador magnetização,

$$\begin{aligned} \mathbf{m}_i^x &\equiv c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\downarrow} + c_{i\downarrow}^\dagger c_{i\uparrow}, \\ \mathbf{m}_i^y &\equiv -i \left( c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\downarrow} - c_{i\downarrow}^\dagger c_{i\uparrow} \right), \\ \mathbf{m}_i^z &\equiv \eta_{i\uparrow} - \eta_{i\downarrow}. \end{aligned} \quad (4.26)$$

Disso, podemos obter o momento local expresso como

$$\langle \mathbf{m}_i^2 \rangle = \langle (\mathbf{m}_i^x)^2 + (\mathbf{m}_i^y)^2 + (\mathbf{m}_i^z)^2 \rangle. \quad (4.27)$$

Outras grandezas igualmente relevantes são o fator de estrutura magnético e a susceptibilidade. O primeiro pode ser escrito na forma

$$S(\mathbf{q}) = \frac{1}{N_s} \sum_{ij} e^{i\mathbf{q}\cdot(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)} \langle \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j \rangle, \quad (4.28)$$

enquanto o segundo é dado por

$$\chi(\mathbf{q}) = \frac{1}{N_s} \sum_{ij} e^{i\mathbf{q}\cdot(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)} \int_0^\beta d\tau \langle \mathbf{S}_i(\tau) \cdot \mathbf{S}_j \rangle. \quad (4.29)$$

A Equação 4.27 fornece um indício de ordenamento magnético através da visualização do momento total do sistema. A Equação 4.28 é uma transformada de Fourier das funções de

correlação entre os spins de diferentes sítios da rede. Esta função é um ponto de partida na busca de correlações de longo alcance no sistema. A susceptibilidade, por outro lado, mantém sua importância no apelo experimental, visto que é essa função que é medida quando tratamos de sistemas em que se buscam correlações magnéticas.

### 4.3.2 O problema do sinal negativo

Em algumas situações, os determinantes na Equação 4.19 apresentam valores negativos, o que gera a impossibilidade da aplicação destes como pesos probabilísticos no *importance sampling* sobre as configurações de Ising. Este problema limita o tratamento de sistemas em temperaturas baixas, dificultando assim o estudo de problemas que envolvem efeitos de interação pouco intensos em relação as flutuações térmicas. Entretanto, em alguns casos particulares tal inconveniente pode ser evitado, como por exemplo, em sistemas que apresentam simetria partícula-buraco que, em geral, surge como consequência de geometrias *bipartite* em regime *half-filling*. Neste trabalho fizemos uso deste tipo de simetria, evitando assim o problema em questão.

# Capítulo 5

## Modelo de Anderson *depleted* bidimensional

### 5.1 Introdução

Neste capítulo apresentamos nossos resultados para o tratamento do modelo de Anderson *depleted*, pelo método de Monte Carlo Quântico. Na Seção 5.2, discutimos os resultados de Titvinidze *et al*[4], para as redes em uma e duas dimensões, utilizando aproximações de Hartree-Fock, DMGR (em uma dimensão) e DMFT. Na Seção 5.3, apresentamos nossa abordagem, tratando apenas a rede bidimensional.

### 5.2 Modelo de Anderson *depleted* 1-D e 2-D

Titvinidze *et al*[4], estudaram o modelo de Anderson com depleções regulares em uma e duas dimensões, visando compreender as propriedades magnéticas do estado fundamental do sistema, em regime *half-filling*. A Figura 5.1 representa o caso bidimensional para a rede de Anderson *depleted* abordada.

O Hamiltoniano que descreve o modelo é dado por

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{\text{PAM}} = & -t \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} \left( a_{i\sigma}^\dagger b_{j\sigma} + \text{H.c.} \right) + V \sum_{j \in B, \sigma} \left( b_{j\sigma}^\dagger c_{k_j, \sigma} + \text{H.c.} \right) + U \sum_{j \in B} \eta_{k_j \uparrow}^{(c)} \eta_{k_j \downarrow}^{(c)} \\ & - \mu \sum_{i \in A, \sigma} \eta_{i\sigma}^{(a)} - \mu \sum_{j \in B, \sigma} \eta_{j\sigma}^{(b)} + (\epsilon - \mu) \sum_{j, \sigma} \eta_{k_j, \sigma}^{(c)} \end{aligned} \quad (5.1)$$

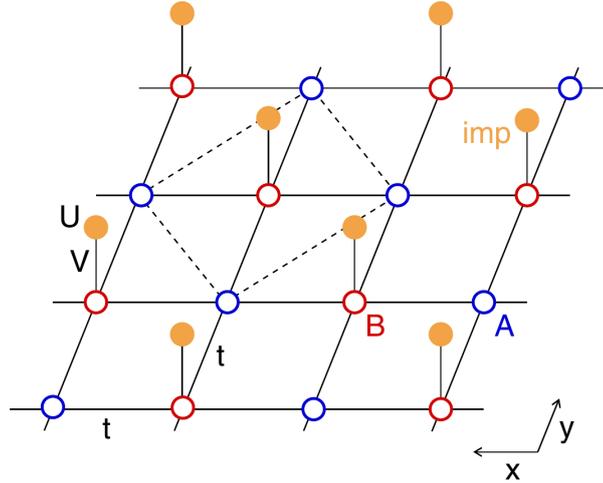


Figura 5.1: Ilustração para a rede de Anderson *depleted* bidimensional. Os elétrons de condução estão distribuídos entre os sítios A's (em azul) e B's (em vermelho) de uma rede *bipartite*. R impurezas magnéticas (em laranja), conectam-se com os sítios B's através da hibridização V e contabilizam a interação Coulombiana U. A rede apresenta uma quantidade total de sítios  $L = 2R$ , que é a soma da quantidade de sítios A's e de sítios B's. As linhas tracejadas indicam uma célula unitária. Figura extraída da referência [4].

onde os operadores  $\mathbf{a}_{i\sigma}^\dagger$  ( $\mathbf{a}_{i\sigma}$ ),  $\mathbf{b}_{j\sigma}^\dagger$  ( $\mathbf{b}_{j\sigma}$ ) e  $\mathbf{c}_{k_j\sigma}^\dagger$  ( $\mathbf{c}_{k_j\sigma}$ ) criam (destroem) um elétron com spin  $\sigma = \uparrow, \downarrow$  num sítio  $i$ , da sub-rede A, num sítio  $j$ , da sub-rede B e num sítio de impureza  $k$ , respectivamente. O índice  $k_j$  representa um sítio  $j$ , da impureza, acoplado a um sítio  $j$  da sub-rede B. O termo de *hopping*,  $t$ , existe somente entre os vizinhos imediatos das sub-redes A e B. O termo V quantifica a hibridização existente entre os elétrons B's e os sítios localizados C's. Os termos  $\eta_{i\sigma}^{(a)} = \mathbf{a}_{i\sigma}^\dagger \mathbf{a}_{i\sigma}$ ,  $\eta_{j\sigma}^{(b)} = \mathbf{b}_{j\sigma}^\dagger \mathbf{b}_{j\sigma}$  e  $\eta_{k_j\sigma}^{(c)} = \mathbf{c}_{k_j\sigma}^\dagger \mathbf{c}_{k_j\sigma}$  representam os correspondentes operadores de número de ocupação.

### 5.2.1 Caso não interagente ( $U=0$ )

O estudo do caso não interagente,  $U = 0$ , mostra o caráter das bandas de energia do sistema. Como mostrado na Figura 5.1, o sistema apresenta três tipos diferentes de sítios por célula primitiva, de modo que o Hamiltoniano não interagente pode ser escrito, na representação do vetor de onda  $\mathbf{k}$ , como

$$H = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \begin{bmatrix} \mathbf{a}_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger & \mathbf{b}_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger & \mathbf{c}_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger \end{bmatrix} \begin{bmatrix} -\mu & \epsilon(\mathbf{k}) & 0 \\ \epsilon(\mathbf{k}) & -\mu & V \\ 0 & V & -\mu \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{a}_{\mathbf{k}, \sigma} \\ \mathbf{b}_{\mathbf{k}, \sigma} \\ \mathbf{c}_{\mathbf{k}, \sigma} \end{bmatrix}, \quad (5.2)$$

onde os termos  $\epsilon(\mathbf{k})$  representam a relação de dispersão para os elétrons de condução, no caso de  $V = 0$ , e são dados por

$$\epsilon(\mathbf{k}) = -2t \sum_{s=1}^D \cos(k_s), \quad (5.3)$$

onde o limite superior do somatório representa a dimensão do sistema. A diagonalização do Hamiltoniano da Equação 5.2 fornece as bandas de energia, dadas por

$$\begin{aligned} \eta_1(\mathbf{k}) &= -\xi(\mathbf{k}) - \mu, \\ \eta_2(\mathbf{k}) &= -\mu, \\ \eta_3(\mathbf{k}) &= \xi(\mathbf{k}) - \mu, \end{aligned} \quad (5.4)$$

onde  $\xi(\mathbf{k}) = \sqrt{\epsilon(\mathbf{k})^2 + V^2}$ . A banda  $\eta_2$  é não dispersiva, ou *flat*. A presença deste tipo de banda também é considerada como uma possível rota para o magnetismo. Para mais detalhes sugiro as referências [20] e [23]. Como consequência do regime *half-filling*, a banda  $\eta_1$  é completamente ocupada por  $L$  elétrons e a banda  $\eta_3$  permanece vazia. Portanto,  $L/2$  elétrons, com spin  $\sigma = \uparrow, \downarrow$  ocupam a banda *flat*,  $\eta_2$ . Isto resulta numa degenerescência de  $2^{L/2}$  estados para o estado fundamental do sistema, no caso não interagente. Contudo, devido ao caráter *flat* da banda em questão, um estado magneticamente ordenado é favorecido para  $U > 0$ [4]. Devido a isso, toma-se para discussão somente o estado totalmente polarizado no caso não interagente, visando fazer uma comparação com o caso interagente, em função da hibridização,  $V$ , abordado na próxima seção. Assim, considerando que o sistema apresenta três tipos diferentes de sítios, A, B e C (impureza), tal estado é definido pelos momentos individuais destes,  $\mathbf{m}_A$ ,  $\mathbf{m}_B$  e  $\mathbf{m}_{\text{imp}}$ , que são dados por

$$\mathbf{m}_A = \langle \eta_{i\uparrow}^{(a)} \rangle - \langle \eta_{i\downarrow}^{(a)} \rangle,$$

$$\mathbf{m}_B = \langle \eta_{j\uparrow}^{(b)} \rangle - \langle \eta_{j\downarrow}^{(b)} \rangle, \quad (5.5)$$

$$\mathbf{m}_{\text{imp}} = \langle \eta_{k\uparrow}^{(c)} \rangle - \langle \eta_{k\downarrow}^{(c)} \rangle,$$

de modo que  $\mathbf{m} = \mathbf{m}_A + \mathbf{m}_B + \mathbf{m}_{\text{imp}} = \pm 1$ . Tomando-se então o caso  $\mathbf{m} = 1$ , é possível analisar a dependência da hibridização,  $V$ , para as diferentes contribuições de  $\mathbf{m}$ , por intermédio das polarizações magnéticas por spin, obtidas do conjunto de Equações 5.5 e dadas por

$$\mathbf{m}_A = \frac{2}{L} \sum_{\mathbf{k}} \frac{V^2}{\epsilon(\mathbf{k})^2 + V^2},$$

$$\mathbf{m}_B = 0, \quad (5.6)$$

$$\mathbf{m}_C = \frac{2}{L} \sum_{\mathbf{k}} \frac{\epsilon(\mathbf{k})^2}{\epsilon(\mathbf{k})^2 + V^2}.$$

Para o caso  $D = 2$ , tais somas são calculadas numericamente. Em  $D = 1$ , elas podem ser calculadas analiticamente, sendo dadas por

$$\mathbf{m}_A = \frac{V}{\sqrt{V^2 + 4t^2}},$$

$$\mathbf{m}_B = 0, \quad (5.7)$$

$$\mathbf{m}_C = \frac{\sqrt{V^2 + 4t^2} - V}{\sqrt{V^2 + 4t^2}}.$$

Os resultados são mostrados na Figura 5.2, como linhas tracejadas para  $D=1$  e  $D=2$ .

Observamos a existência de um *crossover* do estado totalmente polarizado entre os sítios A's e C's. Para o caso de  $V$  fraco, os momentos magnéticos permanecem localizados nos sítios C's, que são as impurezas. Contudo, com o aumento da hibridização, ocorre uma transferência dos momentos dos sítios C's para os sítios A's, enquanto os momentos em B permanecem nulos, de modo que o momento total é dado por  $\mathbf{m}_A + \mathbf{m}_C = 1$ . Embora estes sejam apenas os momentos locais, este comportamento é um indício de ordenamento magnético no sistema. Na seção seguinte, apresentamos os resultados para o caso interagente,  $\mathbf{U} \neq 0$ , para analisar se tal comportamento persiste.

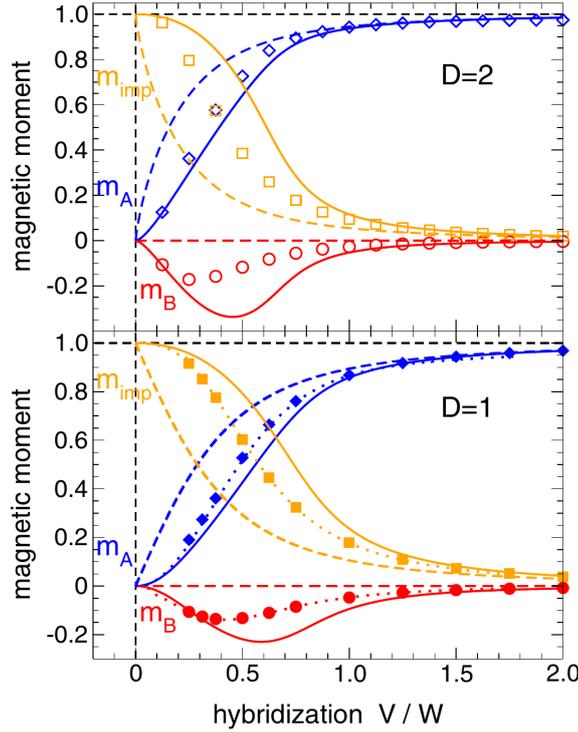


Figura 5.2: Momentos magnéticos ordenados nos três tipos de sítios da rede,  $m_A$ ,  $m_B$  e  $m_{\text{imp}}$ , para as dimensões,  $D = 2$  (acima) e  $D = 1$  (abaixo), como função da hibridização  $V/W$ , onde  $W = 8(D = 2)$  e  $W = 4(D = 1)$ , é o comprimento de banda de elétrons livres. Linhas tracejadas: estado fundamental totalmente polarizado para o caso não interagente. Linhas sólidas: resultados da aproximação de Hartree-Fock para  $U = 2W$ . Símbolos preenchidos para  $D = 1$ : cálculos de DMRG para  $U = 2W$  ( $L = 49$  sítios na rede e  $R = 25$ ). Linhas pontilhadas para  $D = 1$ : cálculos de DMFT para  $U = 2W$  ( $L = 100$  sítios na rede). Símbolos abertos para  $D = 2$ : cálculos de DMFT para  $U = 2W$  ( $L = 1000 \times 1000$ ). Figura extraída da referência [4].

### 5.2.2 Abordagens numéricas para o caso interagente ( $U \neq 0$ )

Nesta seção, discutiremos de maneira breve alguns dos resultados para  $U \neq 0$  e suas semelhanças com o caso não interagente.

Seja  $|F0\rangle$  o mar de Fermi resultante do preenchimento das bandas  $\eta_1$ , com  $L$  elétrons, e  $\eta_2$ , com  $L/2$  elétrons, com spin **up**, que é o estado totalmente polarizado.

$$|F0\rangle = \prod_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k},m=2,\uparrow}^\dagger \prod_{\mathbf{k},\sigma} c_{\mathbf{k},m=1,\sigma}^\dagger |\text{vacuum}\rangle \quad (5.8)$$

Para  $U = 0$ , este é somente um entre  $2^{L/2}$  estados fundamentais, devido a degenerescência oriunda do caráter *flat* da banda  $\eta_2$ . O argumento não trivial desenvolvido por Mielke e Tasaki[4, 18] sustentava que o estado totalmente polarizado se tornaria o único estado fundamental, para qualquer  $U > 0$ . Contudo, os cálculos obtidos pelo método de Hartree-Fock, mostram que o estado fundamental,  $|\text{HF}\rangle$ , é mais estável do que o estado totalmente polarizado:  $\langle \text{HF} | \mathcal{H} | \text{HF} \rangle < \langle F0 | \mathcal{H} | F0 \rangle$  para  $V \neq 0$  e  $V \neq \infty$ . As polarizações para os diferentes sítios são mostradas como linhas sólidas na Figura 5.2. Os cálculos foram feitos para  $U = 8$  ( $D=1$ ) e  $U = 16$  ( $D=2$ ). Além da diferença nítida para os momentos magnéticos dos sítios A's e nas impurezas, os momentos nos sítios B's não mais apresentam valor nulo, de modo que agora,  $m_A + m_B + m_{\text{imp}} = 1$ .

Embora o *crossover* permaneça, o resultado de Hartree-Fock para o estado fundamental mostra uma diferença nítida nos momentos. Ainda que estes apresentem as mesmas tendências para os limites de  $V \rightarrow 0$  e  $V \rightarrow \infty$ , seu comportamento intermediário difere bastante, mostrando que as interações não podem ser desprezadas neste sistema. Para uma melhor compreensão disso, tais resultados são comparados com os métodos de DMGR, em uma dimensão, e DMFT. No caso unidimensional, os resultados exatos de DMRG, mostrados como símbolos preenchidos na Figura 5.2, foram obtidos para uma rede com  $L = 49$  sítios. Os resultados mostram uma boa concordância com aqueles oriundos de Hartree-Fock, para os valores limite  $V \rightarrow 0$  e  $V \rightarrow \infty$ . Para valores intermediários de  $V$ , entretanto, surgem divergências, visto que este superestima os valores dos momentos B's e das impurezas, ao passo que subestima os momentos no sítios A's. Logo, tal método é capaz de descrever grosseiramente as tendências para as polarizações magnéticas como função de  $V$ , mas falha em previsões quantitativas. Tal conclusão é ainda reforçada pelos resultados de DMFT em uma e duas dimensões, mostrados na Figura 5.2. Para  $D = 1$ , os resultados são apresentados como linhas pontilhadas e para  $D = 2$ , como símbolos abertos, ambos mostrando boa concordância com os cálculos de DMRG. Tais resultados mostram que o estado fundamental magnético no modelo abordado é fortemente correlacionado. Logo, é razoável pensar em tratar tais tipos de sistemas por um método que não despreze os efeitos de correlações. Isto justifica nossa abordagem pelo método de Monte Carlo, apresentada a seguir.

### 5.2.3 Modelo de Anderson 2-D *depleted* - Monte Carlo Quântico

Nesta seção, abordaremos os resultados deste trabalho, que são oriundos do estudo do modelo de Anderson com depleções regulares, em duas dimensões, apresentado na Figura 5.1, cujo Hamiltoniano é dado na Equação 5.1, através do método de Monte Carlo Quântico. Mais precisamente, foram utilizadas simulações do DQMC para a obtenção das funções de correlação (fator de estrutura) e em seguida obtivemos as magnetizações entre os sítios da rede, em temperatura finita, mantendo-se  $\mathbf{U} = 4$  e  $\mathbf{t} = 1$  constantes.

A ocorrência das correlações é observada, em princípio, pelo fator de estrutura magnético, que é uma transformada de Fourier das funções de correlação do sistema. A limitação às redes de tamanho finito faz com que não seja possível caracterizar um estado magnético, pois o conceito de quebra espontânea de simetria só é válido no limite termodinâmico. Devido à impossibilidade de se atingir tal condição, faz-se uso do método *finite-size scaling*[45], que é uma extrapolação dos resultados obtidos na rede finita, para o limite termodinâmico, o que permite verificar se as correlações no sistema persistem, quando a quantidade de sítios tende ao infinito.

Resolvemos redes de tamanhos ( $N_{\text{cell}} = L^2$ )  $4 \times 4$ ,  $5 \times 5$ ,  $6 \times 6$  e  $7 \times 7$ . Inicialmente analisamos o fator de estrutura magnético, que é dado por

$$\mathbf{S}(\mathbf{q}) = \frac{1}{N_s} \sum_{ij} e^{i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{i}-\mathbf{j})} \langle \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j \rangle, \quad (5.9)$$

apresentado no capítulo anterior.

A Figura 5.3 mostra o comportamento do fator de estrutura ferromagnético ( $\mathbf{q} = \mathbf{0}$ ) como função da temperatura, para um valor fixo do acoplamento  $\mathbf{V}$  e para os tamanhos de rede considerados. As expressões para o número de sítios,  $2 \times L^2$ , significam que  $\mathbf{S}(\mathbf{q} = 0)$  foi obtido para uma célula unitária (vide Figura 5.1). O que se observa na Figura 5.3, é a presença de correlações entre os spins, que tornam-se efetivas para temperaturas suficientemente baixas, justificando-se assim o crescimento do fator de estrutura. Para sistemas fortemente correlacionados, esta função deve crescer juntamente com o tamanho da rede, o que pode ser percebido para as curvas de diferentes quantidades de sítios, onde as maiores redes apresentam, de fato, um maior valor para esta função. A estabilização desta, para temperaturas mais baixas está associada ao fato de que as redes são todas finitas, de modo que as correlações atingem seu valor máximo para cada tamanho de

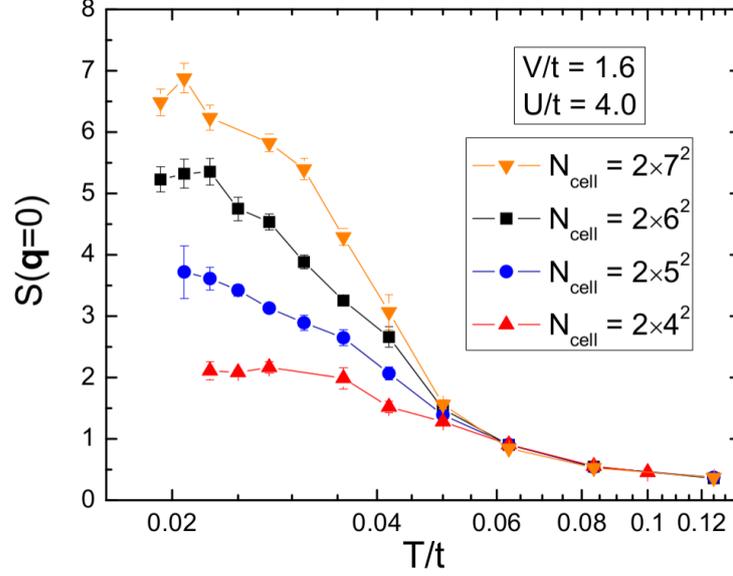


Figura 5.3: Fator de estrutura ferromagnético para uma rede de Anderson com depleções regulares em função da temperatura, para diferentes quantidades de sítios na rede.

rede específico. Assim, para ter uma ideia do comportamento das correlações no limite termodinâmico, partimos para o *finite-size scaling*[45] dos fatores de estrutura magnéticos. A magnetização é obtida normalizando-se o fator de estrutura em relação ao tamanho da rede, através da expressão

$$m_{\mathbf{q}}^2 = S^{\alpha\beta}(\mathbf{q})/L^2. \quad (5.10)$$

Esta apresentará um valor não nulo no limite termodinâmico  $1/L \rightarrow 0$  se o sistema apresentar correlações de longo alcance. Contudo, como a célula primitiva é composta de três sítios diferentes, o *finite-size scaling* pode ser feito tanto para as correlações individuais entre tais sítios, como para as correlações em uma célula inteira. Para visualizar isto, examinamos o fator de estrutura ferromagnético “global”, dado por

$$S(0) = \frac{S_{AA}^F + 2S_{AB}^{AF} + 2S_{BC}^{AF} + S_{BB}^F + 2S_{AC}^F + S_{CC}^F}{3}, \quad (5.11)$$

com

$$S_{\alpha\beta}^{F(AF)} = \pm \frac{1}{N_{\text{cell}}} \sum_{i \geq j} \langle S_i^{z(\alpha)} S_j^{z(\beta)} \rangle, \quad (5.12)$$

onde  $\alpha$  e  $\beta$  rotulam os sítios A's, B's e C's e os índices,  $i$  e  $j$ , identificam suas posições. Os sinais positivos e negativos estão relacionados às correlações ferro e antiferromagnéticas, respectivamente. O *finite-size scaling* individual é obtido realizando o mesmo procedimento para as componentes individuais do fator de estrutura, isto é,  $S_{\alpha\beta}^{F(AF)}/L^2 \rightarrow (m_{\alpha\beta}^{F(AF)})^2$ . Assim, obtemos a Figura 5.4 para o *finite-size scaling* do fator de estrutura global, para vários valores da hibridização  $V$ . O mesmo é feito para os fatores de estrutura individuais, porém, apenas para  $V = 2.4$ , mostrados nas Figuras 5.5 e 5.6.

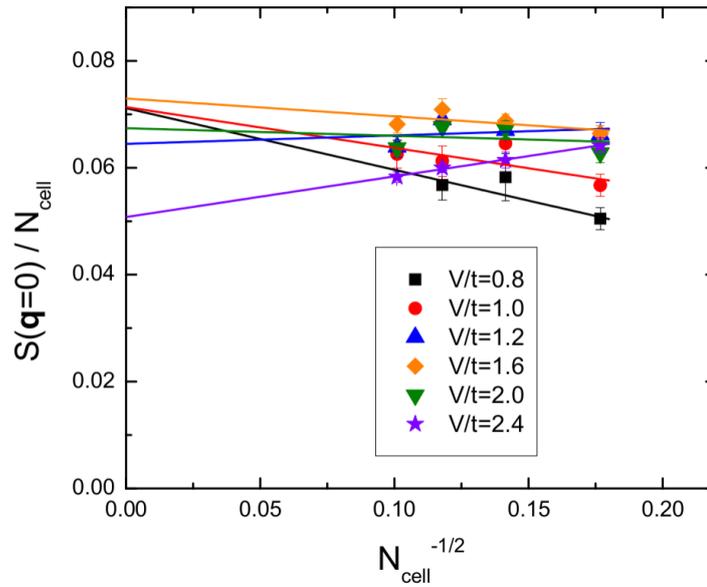


Figura 5.4: *Finite-size scaling* do fator de estrutura global para vários valores da hibridização  $V$ . Cada uma das extrapolações desta função correspondem aos valores quadráticos da magnetizações ( $m_{\text{tot}}^2$ ), para diferentes valores de  $V$ .

Os valores negativos obtidos para os *scalings* de SBB, na Figura 5.5 e SAB, na Figura 5.6, merecem atenção e serão justificados mais adiante.

Com a extrapolação dos fatores de estrutura para o limite termodinâmico, foi possível construir as curvas de magnetização total e individual em função da hibridização,  $V$ , para o modelo de Anderson com depleções regulares. A Figura 5.7 mostra tais resultados.

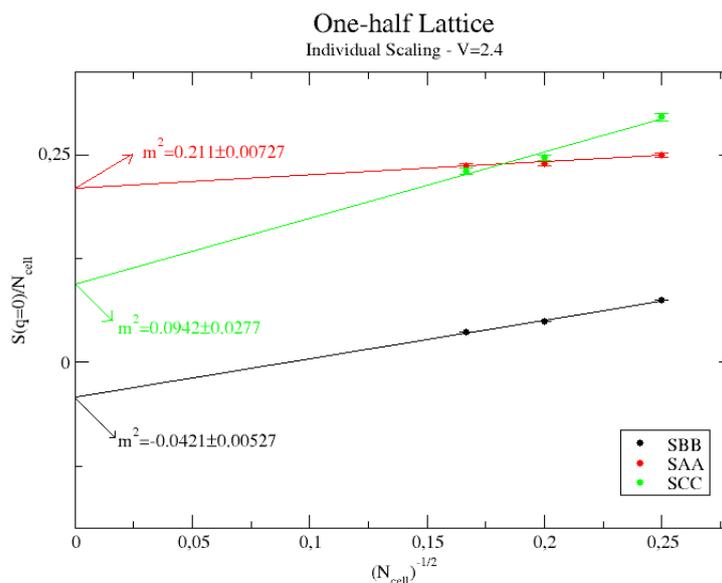


Figura 5.5: *Finite-size scaling* dos fatores de estrutura individuais  $S_{AA}$ ,  $S_{BB}$  e  $S_{CC}$ . Cada uma das extrapolações destas funções correspondem aos valores quadráticos das magnetizações ( $m_q^2$ ), para  $V = 2.4$ .

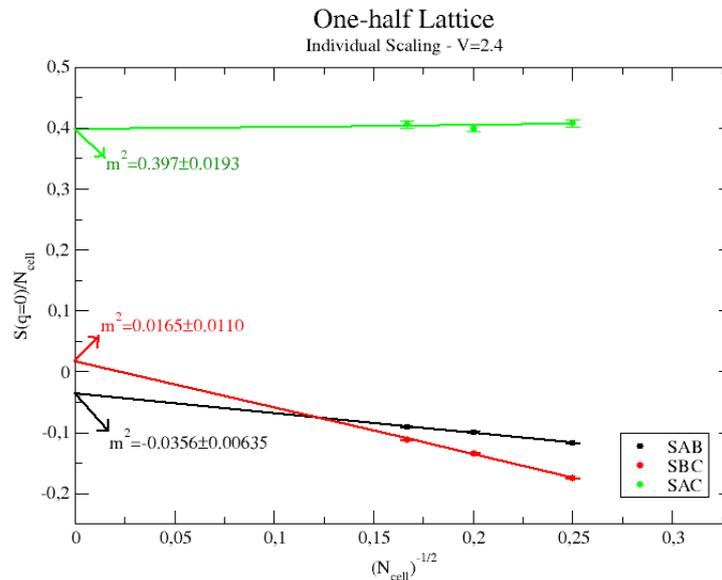


Figura 5.6: *Finite-size scaling* dos fatores de estrutura individuais  $S_{AB}$ ,  $S_{BC}$  e  $S_{AC}$ . Cada uma das extrapolações destas funções correspondem aos valores quadráticos das magnetizações ( $m_q^2$ ) do sistema, para  $V = 2.4$ .

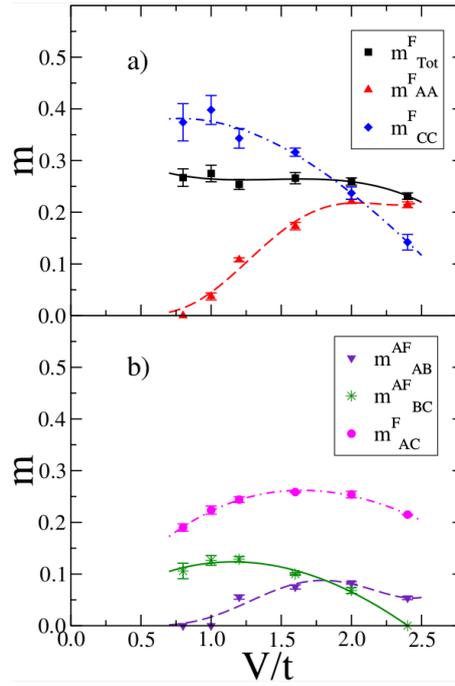


Figura 5.7: Magnetizações total e individuais como função da hibridização,  $V$ , para o modelo de Anderson com depleções regulares e em regime *half-filling*. Resultados obtidos através do *finite-size scaling* dos fatores de estrutura magnéticos, onde estes foram obtidos pelo método de Monte Carlo quântico.

Inicialmente, observamos a magnetização total do sistema,  $m_{\text{tot}}$ , que apresenta um valor não nulo, confirmando a ocorrência do ordenamento ferromagnético. Tal resultado era esperado devido a dois fatores: primeiro, a presença de uma banda *flat*, que atua reduzindo o custo do *hopping* cinético dos elétrons em relação à dupla ocupação do termo de Hubbard. Segundo, a aplicabilidade do teorema de Tsunetsugu[32]. Este teorema diz que uma rede de Kondo *bipartite* e em regime *half-filling* tem spin total dado por  $S_{\text{tot}} = |\hat{N}_A - \hat{N}_B|/2$ . Apesar de estarmos tratando uma rede de Anderson, espera-se que o resultado de Tsunetsugu possa também ser aqui aplicado, devido ao mapeamento do modelo de Anderson no modelo da rede de Kondo. Uma vez que o sistema apresenta spin total maior do que zero, pode-se esperar ordenamento ferromagnético.

Em se tratando das magnetizações individuais, observam-se semelhanças e diferenças em relação aos resultados obtidos por campo médio, descritos na seção anterior. De maneira similar, a existência de um *crossover* entre os sítios permanece. Para valores pequenos de  $V$ , a magnetização  $m_{\text{CC}}$  apresenta um valor elevado, o que pode ser descrito pelo mecanismo de acoplamento RKKY, que é efetivo para baixos valores do acoplamento

Kondo,  $J$ , que neste caso ocorre para baixos valores da hibridização,  $V$ , enquanto que  $\mathbf{m}_{AA}$  apresenta valor praticamente nulo. À medida que  $V$  cresce, a magnetização nos sítios  $A$ 's passa a ser mais forte ao passo que a magnetização nos sítios  $C$ 's decai. Para compreender esse comportamento, analisamos magnetizações entre os demais sítios da rede. Observemos que a magnetização  $\mathbf{m}_{AA}$  só é relevante quando o termo  $\mathbf{m}_{AB}$  tem contribuição efetiva. Isto mostra a relevância das correlações  $AB$  para o acoplamento entre os sítios  $A$ 's. O termo  $\mathbf{m}_{BC}$  é antiferromagnético e decresce com o crescimento de  $V$ , indicando a formação de estados singletos entre os sítios  $B$ 's e  $C$ 's. O termo  $\mathbf{m}_{AC}$  mostra que também existe um acoplamento entre os sítios  $A$ 's e  $C$ 's, de natureza ferromagnética, que se revela mais intenso do que  $\mathbf{m}_{AB}$ , como se pode observar pelo valor da magnetização. Isto sugere que as correlações do tipo  $AC$  também influenciam no acoplamento  $AA$ , podendo mesmo contribuir mais efetivamente do que as correlações do tipo  $AB$ , por serem mais intensas. Assim, as correlações entre os sítios  $A$ 's ocorrem através das correlações  $AB$  e  $AC$ , visto que as correlações  $BC$  são perdidas devido à formação de estados singletos.

Os resultados apresentados na Figura 5.7 também podem ser comparados àqueles obtidos por Shen[33], discutidos no Capítulo 2, para as correlações entre as sub-redes. Para facilitar essa discussão, apresentamos novamente os resultados de Shen, resumidamente.

As correlações entre os spins no estado fundamental são dadas por

$$\begin{aligned} \langle \Psi | \mathbf{S}_{c_i}^+ \cdot \mathbf{S}_{c_j}^- | \Psi \rangle &= \epsilon(i)\epsilon(j)C_{ij}, \\ \langle \Psi | \mathbf{S}_{d_i}^+ \cdot \mathbf{S}_{d_j}^- | \Psi \rangle &= \epsilon(i)\epsilon(j)F_{ij}, \\ \langle \Psi | \mathbf{S}_{c_i}^+ \cdot \mathbf{S}_{d_j}^- | \Psi \rangle &= -\epsilon(i)\epsilon(j) \frac{J_{\perp}}{|J_{\perp}|} G_{ij}, \end{aligned} \quad (5.13)$$

onde  $C_{ij}$ ,  $F_{ij}$  e  $G_{ij} \geq 0$  e  $\epsilon(i) = \mathbf{1}$ , quando  $i \in A$  e  $\epsilon(i) = -\mathbf{1}$ , quando  $i \in B$ , onde  $A$  e  $B$  são as sub-redes e valores positivos (negativos) implicam correlações ferromagnéticas (antiferromagnéticas). O índices  $c$  e  $d$  representam os elétrons de condução e localizados, respectivamente. As correlações entre elétrons  $c$  e  $d$ , num mesmo sítio, são então dadas por

$$\langle \Psi | \mathbf{S}_{c_i}^+ \cdot \mathbf{S}_{d_i}^- | \Psi \rangle = -\frac{J_{\perp}}{|J_{\perp}|} G_{ii}. \quad (5.14)$$

A primeira consequência deste resultado é o fato de que correlações entre sítios de mesmo tipo e na mesma sub-rede (AA, BB e CC) apresentam correlações ferromagnéticas e, entre sítios de condução de sub-redes diferentes (AB), estas são antiferromagnéticas, o que acorda com nossos resultados. Contudo, o fato de que as correlações do tipo CC são sempre ferromagnéticas é uma característica específica da geometria de rede aqui abordada, visto que se ambas as sub-redes apresentassem sítios C's a elas acoplados, as correlações entre sítios C's de sub-redes diferentes seriam antiferromagnéticas. Para as correlações entre sítios de condução (A e B) e localizados (C), vemos, pela Equação 5.14, a dependência do acoplamento J da rede. Como o acoplamento BC é antiferromagnético ( $J \sim V^2/U$ ), o sítio C pertence à sub-rede A, o que justifica o caráter ferromagnético do acoplamento AC, o que também está em acordo com o teorema de Tsunetsugu.

Agora voltamos à discussão do *finite size scaling*. Observamos valores negativos para os *scalings* de SBB, na Figura 5.5 e SAB, na Figura 5.6. Como partimos da expressão  $\mathbf{m}_{\mathbf{q}}^2 = \mathbf{S}^{\alpha\beta}(\mathbf{q})/L^2$ , tais valores não apresentam sentido físico, visto que as magnetizações seriam quantidades complexas. A justificativa para esses resultados está no fator de estrutura,  $\mathbf{S}(\mathbf{q})$ , que foi obtido para o ordenamento ferromagnético ( $\mathbf{q} = 0$ ). Em nossa discussão sobre as correlações, acima, verificamos que as correlações do tipo BB seriam ferromagnéticas. Entretanto, o fato de que o *scaling* do fator de estrutura ferromagnético apresentar um valor negativo mostra que tais correlações não “sobrevivem” no limite termodinâmico, de modo que a magnetização  $\mathbf{m}_{\text{BB}}$  é nula. Para o caso AB, observamos que estes sítios apresentam ordenamento antiferromagnético. Logo, o fator de estrutura para esse par de sítios deveria ser calculado para  $\mathbf{q} = \pi$ , o que corresponde ao fator de estrutura antiferromagnético,  $\mathbf{S}(\mathbf{q} = \pi)$ . Com isto, o valor do módulo da magnetização permaneceria o mesmo, porém com o sinal oposto, ficando positivo.

# Capítulo 6

## Considerações finais

A partir dos resultados deste trabalho, observamos como as propriedades magnéticas de uma rede de Anderson bidimensional podem ser modificadas quando sujeitas à depleções regulares. Utilizando o método *determinantal quantum monte carlo*, as magnetizações totais (para a célula unitária) e individuais (entre os sítios da célula unitária) foram obtidas, mostrando a ocorrência de um *crossover* nas correlações locais (mesmo sítio) da rede e o mesmo foi analisado em termos das correlações individuais (sítios diferentes).

Inicialmente analisamos os fatores de estrutura ferromagnéticos da rede, buscando indícios de correlações de longo alcance capazes de sustentar ordenamento magnético. O método de Monte Carlo possibilitou a verificação das correlações de longo alcance nas redes finitas, fornecendo os indícios iniciais do ordenamento magnético. Em seguida fizemos uso do *finite-size scaling*[45] para calcularmos o valor extrapolado das grandezas envolvidas, no limite termodinâmico. Com isto foi possível fazer uma análise das magnetizações e das correlações dos sistema. Além disso, a aplicabilidade do conceito de ferromagnetismo de banda *flat* a sistemas interagentes, bem como a extensão do teorema de Tsunetsugu[32] e os resultados de Shen[33] para o modelo de Anderson mostram possíveis rotas para o ordenamento magnético.

Fica como perspectiva a possibilidade de variação do regime de depleção, visto que o caso aqui tratado é apenas uma das possibilidades de depleção em uma rede de Anderson, de modo que tais regimes podem ser variados, retirando ou acrescentando sítios magnéticos localizados, de maneira regular ou mesmo aleatória. Além disso, um estudo das propriedades de transporte é importante no cálculo da condutividade, que permitirá a caracterização do sistema, se é condutor ou isolante.

# Referências Bibliográficas

- [1] H.Tsunetsugu, M.Sigrist, K.Ueda *The ground-state phase diagram of the one-dimensional Kondo lattice model*, Reviews of Modern Physics, Vol. 69, Number 3 (1997).
- [2] M.Vekic, J.W.Cannon, D.J.Scalapino, R.T.Scalettar, R.L.Sugar, *Competition between Antiferromagnetic Order and Spin-Liquid Behavior in the Two-Dimensional Periodic Anderson Model at Half Filling*, Physical Review, Vol 47, Number 12 (1995).
- [3] S.Seo, Xin Lu, J-X.Zhu, R.R.Urbano, N.Curro, E.D.Bauer, V.A.Sidorov, L.D.Pham, Tuson Park, Z.Fisk, J.D.Thompson, *Disorder in quantum critical superconductors*, Nature Physics, Vol 10, Pages 120?125 (2014).
- [4] I.Titvinidze, A.Schwabe, M.Potthoff, *Ferromagnetism of magnetic impurities coupled indirectly via conduction electrons: Insights from various theoretical approaches*, Physical Review, B 90, 045112 (2014).
- [5] S.Doniach, P.Fazekas, *Magnetism in doped Kondo insulators*, Philosophical Magazine B 1171-1183, Vol 65, Number 6 (1992).
- [6] R.Soliie, P.Schlottmann, *A simple theory of the Kondo*, J.Appl.Phys 69, 5478 (1991).
- [7] C.C.Yu, *Numerical renormalization-group study of a Kondo hole in a one-dimensional Kondo insulator*, Physical Review B, Volume 54, Number 22 (1996).
- [8] P.Schlottmann, *Influence of a Kondo-hole impurity band on magnetic instabilities in Kondo insulators*, Physical Review B, Vol 54, Number 17 (1996).
- [9] R.R.Urbano, B.-L.Young, N.J.Curro, J.D.Thompson, L.D.Pham, Z.Fisk, *Interacting Antiferromagnetic Droplets in Quantum Critical CeCoIn<sub>5</sub>*, Physical Review Lectures, Vol 99, 146402 (2007).

- [10] A.Benali, Z.J.Bai, N.J.Curro, R.T.Scalettar, *Impurity-induced antiferromagnetic domains in the periodic Anderson model*, Physical Review B, Vol 94, 085132 (2016).
- [11] F.F.Assaad, *Depleted Kondo lattices: Quantum Monte Carlo and mean-field calculations*, Physical Review B, Vol 65, 115104 (2002).
- [12] I.Titvinidze, A.Schwabe, M.Potthoff, *Strong-coupling limit of depleted Kondo- and Anderson-lattice models*, Eur. Phys. J. B 88, 42 (2015).
- [13] D.C.Mattis, *The Theory of Magnetism Made Simple*, 1st ed, World Scientific (2006).
- [14] A.Sharma, *The Hubbard model at half a century*, Nature Physics, Vol 9, 523, (2013).
- [15] H.Tasaki, *From Nagaoka's Ferromagnetism to Flat-Band Ferromagnetism and Beyond*, Department of Physics, Gakushuin University, Tokyo 171-8588, Japan (1998).
- [16] University of California-Davis, *Elementary Introduction to the Hubbard Model* <http://quest.ucdavis.edu/index.html> → Documentation →, Elementary Introduction to the Hubbard Model (PDF).
- [17] E.H.Lieb *The Hubbard Model: Some Rigorous Results And Open Problems*, Departments of Mathematics and Physics, Princeton University, NJ 08544 USA (1993).
- [18] P.Fazekas, *Lectures and Notes on Electron Correlation and Magnetism*, Vol 5, World Scientific (1999).
- [19] [folk.ntnu.no/johnof/magnetism-2012.pdf](http://folk.ntnu.no/johnof/magnetism-2012.pdf), *The Heisenberg model*.
- [20] A.Mielke, *The Hubbard model and its properties*, Institute for Theoretical Physics, Heidelberg, (2015).
- [21] E.H.Lieb, *Two Theorems on the Hubbard Model*, Physical Review, Vol 62, Number 10, (1989).
- [22] M.Rasetti, *The Hubbard Model - Recent Results*, Vol 7, World Scientific, (1991).
- [23] A.Mielke, H.Tasaki, *Ferromagnetism in the Hubbard Model- Examples from Models with Degenerate Single-Electron Ground States*, Commun. Math. Phys. 158, 341-371 (1993).

- [24] D.Vollhardt, N.Blümer, K.Held, M.Kollar, J.Schlipf, M.Ulmke, and J.Wahle, *Metallic Ferromagnetism: Progress in our Understanding of an Old Strog-Coupling Problem*, Theoretische Physik III, Elektronische Korrelationen und Magnetismus, Universität Augsburg, D-86135 Augsburg, Germany (1998).
- [25] P.W.Anderson, *Localized Magnetic States in Metals*, Physical Review, Vol 124, Number 1 (1961).
- [26] E.Pavarini, E.Koch, F.Anders, M.Jarrell, *Correlated Electrons: From Models to Materials-The Kondo Effect*, Technische Universität Dortmund (2012).
- [27] L.Kouwenhoven, L.Glazman, *Revival of the Kondo effect*, Physics World, Vol 14, Number 1 (2001).
- [28] L.C.Martin *The Kondo Lattice Model: a Dynamical Cluster Approximation Approach*, Dissertation zur Erlangung des naturwissenschaftlichen Doktorgrades der Julius-Maximilians-Universität Würzburg (2009).
- [29] E.Demler, *Strongly correlated systems in atomic and condensed matter physics*, Lecture notes for Physics, Harvard University, November 17 (2010).
- [30] R.J.Elliot, *Magnetic Properties of Rare Earth Metals*, University of Oxford, Department of Theoretical Physics, Springer Science and Business Media (1972).
- [31] M.Gulácsi, *The one dimensional Kondo lattice model at partial band filling*, Adv. Phys, Vol 53, pages 769-937 (2004).
- [32] H.Tsunetsugu, *Rigorous results for half-filled Kondo lattices*, Physical Review B, Vol 55, Number 5 (1997).
- [33] SQ.Shen, *Total spin and antiferromagnetic correlation in the Kondo model*, Physical Review B, Vol 53, Number 21 (1996).
- [34] GS.Tian, *Lieb's Spin-Reflection-Positivity Method and Its Applications to Strongly Correlated Electron Systems*, Journal of Statistical Physics, Vol 116 (2004).
- [35] J.Keeling, *Quantum Magnetism*, University of St. Andrews-University; Department → Condensed Matter Physics → Keeling Group → Members → Jonathan Keeling, <https://www.st-andrews.ac.uk/jmjk/keeling/teaching/index.shtml>

- [36] R.R.Santos, *Introduction to Quantum Monte Carlo Simulations for Fermionic Systems*, Brazilian Journal of Physics, Vol 33, Number 1 (2003).
- [37] R.Silva, J.R.Drugowich de Felício, *Simulação de Monte Carlo com Repesagem Aplicada ao Calor Específica de Sólidos*, Revista Brasileira de Ensino de Física, Vol 24, Number 2 (2002).
- [38] V.L.Líbero, *De Ising a Metropolis*, Revista Brasileira de Ensino de Física, Vol 22, Number 3 (2000).
- [39] B.Bernu, D.M.Ceperley, *Path Integral Monte Carlo*, Quantum Simulations of Complex Many-Body Systems:From Theory to Algorithms, NIC Series, Vol. 10, ISBN 3-00-009057-6, pp. 51-61 (2002).
- [40] J.Toulouse, R.Assaraf, C.J.Umrigar, *Introduction to the variational and diffusion Monte Carlo methods*, Advances in Quantum Chemistry, Vol 73, Pages 285-314 (2016).
- [41] R.Blankenbecler, D.J.Scalapino, R.L.Sugar, *Monte Carlo calculations of coupled boson-fermion systems. I*, Phys. Rev. D, Vol 24, Number 2278 (1981).
- [42] University of California-Davis, *Computational Quantum Magnetism - Lecture Three: Determinant Quantum Monte Carlo*, <http://quest.ucdavis.edu/index.html> → Documentation → Determinant Quantum Monte Carlo Lecture (PDF).
- [43] J.E.Hirsch, *Two-dimensional Hubbard model: Numerical simulation study*, Physical Review, B 31, Number 7 (1985).
- [44] J.E.Hirsch *Discrete Hubbard-Stratonovich transformation for fermion lattice models*, Physical Review B, Vol 28, Number 7 (1983).
- [45] D.A.Huse, *Ground-state staggered magnetization of two-dimensional quantum Heisenberg antiferromagnets*, Physical Review B, Vol 37, Number 4 (1988).