

Júlio César da Fonseca Evangelista

**Correlação entre spins localizados e itinerantes
com interações de troca, Kondo e magnéticas
em um *cluster* hexagonal (tipo grafeno)**

Campo Grande

13 de janeiro de 2026

Júlio César da Fonseca Evangelista

**Correlação entre spins localizados e itinerantes com
interações de troca, Kondo e magnéticas em um *cluster*
hexagonal (tipo grafeno)**

Dissertação apresentada ao Instituto de Física da Universidade Federal de Mato Grosso do Sul, sendo parte dos requisitos para a obtenção do título de Mestre em Ciência dos Materiais.

Universidade Federal de Mato Grosso do Sul - UFMS

Instituto de Física - INFI

Programa de Pós-Graduação

Orientador: Prof. Dr. João Vítor Batista Ferreira

Campo Grande

13 de janeiro de 2026

Agradecimentos

Ao CENAPAD pelo fornecimento de suas máquinas para executar nossos códigos.

Ao técnico Rodrigo Ferreira Gonçalves Fioravanti responsável pela sala de informática, por sua paciência e auxílio no uso da sala.

Ao colega acadêmico de doutorado Luiz Felipe Scatena Guizado pelo auxílio nas dúvidas referentes a escrita do Latex.

Ao Professor dr. Fábio Mallmann Zimmer pelo algoritmo base que foi de grande serventia para o início do programa aqui abordado.

Aos professores do INFI e INMA pela formação acadêmica e aos meus pais por todo suporte e incentivo.

"What we know is a drop; what we ignore is an ocean."
(Isaac Newton)

Resumo

O estudo das propriedades magnéticas em sistemas de muitos corpos continua sendo um desafio fundamental na Física da Matéria Condensada, sobretudo devido à competição entre correlações eletrônicas fortes, efeitos quânticos coletivos e restrições impostas pela geometria espacial. Modelos simplificados, em particular arranjos finitos de spins, são amplamente utilizados para investigar fenômenos essenciais como interações antiferromagnéticas, frustração magnética, formação de singletos e o acoplamento Kondo entre momentos localizados e itinerantes.

Nesta dissertação analisamos um *cluster* hexagonal, tipo o do grafeno, composto por seis sítios, estrutura que preserva simetrias relevantes e permite examinar de forma controlada a influência de elétrons itinerantes no comportamento de spins localizados. Cada sítio abriga um momento magnético fixo, enquanto elétrons itinerantes se movimentam pela rede, possibilitando a investigação direta da competição entre mobilidade eletrônica e interações de troca.

A descrição teórica é baseada nos hamiltonianos Ising-Kondo e Heisenberg-Kondo, que incorporam termos de energia cinética, interação magnética entre os spins localizados e acoplamento Kondo local. A base quântica do modelo é construída por uma representação binária de estados, e a solução numérica é obtida mediante diagonalização exata e método de Lanczos. Estas matrizes são grandes e crescem rapidamente em função do número de elétrons itinerantes, por isso a necessidade do uso de recursos computacionais como o CENAPAD (Centro Nacional de Processamento de Alto Desempenho), da UNICAMP, permitindo calcular correlações magnéticas relevantes.

A análise foca nas grandezas D , F e S^2 , que caracterizam, respectivamente, a correlação entre spins localizados, a correlação entre spins localizados e itinerantes e o spin total do sistema. Os resultados mostram que a geometria hexagonal exerce papel crucial na distribuição das correlações. Interações Kondo intensas promovem a blindagem dos spins localizados, enquanto o aumento da temperatura tende a suprimir as correlações magnéticas.

Assim, o *cluster* hexagonal revela-se uma plataforma eficaz para compreender, de maneira controlada, a competição entre diferentes mecanismos magnéticos em sistemas correlacionados, constituindo uma base sólida para estudos futuros em outras geometrias e regimes de interação.

Palavras-chave: Frustração Magnética; Efeito Kondo; *cluster* de Spins; grafeno.

Abstract

The study of magnetic properties in many-body systems remains a fundamental challenge in Condensed Matter Physics, mainly due to the competition between strong electronic correlations, collective quantum effects, and constraints imposed by spatial geometry. Simplified models, particularly finite spin arrangements, are widely used to investigate essential phenomena such as antiferromagnetic interactions, magnetic frustration, singlet formation, and the Kondo coupling between localized and itinerant moments.

In this dissertation, we analyze a hexagonal *cluster* similar to that found in graphene composed of six sites, a structure that preserves relevant symmetries and enables a controlled examination of the influence of itinerant electrons on the behavior of localized spins. Each site hosts a fixed magnetic moment, while itinerant electrons move through the lattice, allowing a direct investigation of the competition between electronic mobility and exchange interactions.

The theoretical description is based on the Ising–Kondo and Heisenberg–Kondo Hamiltonians, which incorporate kinetic-energy terms, magnetic interactions between localized spins, and local Kondo coupling. The quantum basis of the model is constructed using a binary representation of states, and the numerical solution is obtained through exact diagonalization and the Lanczos method. These matrices are large and grow rapidly with the number of itinerant electrons, which motivates the use of high-performance computational resources such as CENAPAD (the National High-Performance Computing Center) at UNICAMP, allowing the calculation of the relevant magnetic correlations.

The analysis focuses on the quantities D , F and S^2 , which characterize, respectively, the correlation between localized spins, the correlation between localized and itinerant spins, and the total spin of the system. The results show that the hexagonal geometry plays a crucial role in shaping the distribution of correlations. Strong Kondo interactions promote the screening of localized spins, while increasing temperature tends to suppress magnetic correlations.

Thus, the hexagonal *cluster* proves to be an effective platform for understanding, in a controlled manner, the competition between different magnetic mechanisms in correlated systems, providing a solid foundation for future studies involving other geometries and interaction regimes.

Keywords: Magnetic Frustration; Kondo Effect; *cluster* of Spins; Graphene.

Sumário

1	INTRODUÇÃO	11
2	OBJETIVOS	14
3	TEORIA	15
3.1	Propriedades magnéticas intrínsecas da matéria.	15
3.1.1	Frustração magnética	16
3.1.2	Interação antiferromagnética	16
3.1.3	Efeito Kondo	17
3.2	Hamiltonianos de Ising-Kondo e Heisenberg-Kondo	17
3.3	Fenômenos magnéticos não usuais.	19
4	METODOLOGIA	20
4.1	Estrutura do programa	21
4.2	Programa computacional	23
4.3	Correlações das grandezas físicas	24
4.4	Valor de D em função de J_M	25
4.5	Valor de F	25
4.6	Valor de S^2	27
4.7	Definições magnéticas (análise de J_M)	28
5	RESULTADOS	29
5.1	Sem interação de troca	30
5.2	Tipo Ising-Kondo	31
5.3	Tipo Heisenberg-Kondo ferromagnético	33
5.4	Tipo Heisenberg-Kondo antiferromagnético	37
5.5	Temperatura	49
6	CONCLUSÃO	54
	 ANEXOS	 56
	ANEXO A – CÁLCULO DE D	58
	ANEXO B – INSTALAÇÃO DAS BIBLIOTECAS	68
	ANEXO C – MÁQUINAS	69

ANEXO D – MÉTODO DE LANCZOS	70
ANEXO E – DEMONSTRAÇÃO DO MÉTODO DE LANCZOS . .	71
REFERÊNCIAS	73

Lista de ilustrações

Figura 1 – (a) Ilustração do grafeno - Fonte: (autor). (b) Ilustração do cluster hexagonal - Fonte: (autor)	11
Figura 2 – frustração magnética	17
Figura 3 – singleto	17
Figura 4 – Esquema do algoritmo	23
Figura 5 – Dependência das correlações entre spins em função da amplitude J_K normalizada pela energia cinética t , com parâmetros $J_z = 0 = J_{xy}$ (autor)	30
Figura 6 – $J_z = 0 = J_{xy}$ zoom da figura 5 nos valores iniciais de $\frac{J_K}{t}$ (autor)	31
Figura 7 – $J_z=0,2$ e $J_{xy}=0$ Ising-Kondo. Variação das correlações D , F e S^2 em função de $\frac{J_K}{t}$ (autor)	32
Figura 8 – $J_z=0,2$ e $J_{xy}=0$ Ising-Kondo zoom da figura 7 nos valores iniciais (autor)	32
Figura 9 – As curvas representam a variação da correlação D de zero à três spins para os valores $J_z=0,25$ e $J_{xy}=0,2$ em função de $\frac{J_K}{t}$, logo uma interação Heisenberg-Kondo na direção horizontal. (autor)	33
Figura 10 – $J_z=0,25$ e $J_{xy}=0,2$ Heisenberg-Kondo de direção horizontal. Zoom da figura 9, nos valores iniciais de $\frac{J_K}{t}$ (autor)	34
Figura 11 – Variação da correlação F com os valores $J_z=0,25$ e $J_{xy}=0,2$ Heisenberg-Kondo na direção horizontal (autor)	35
Figura 12 – $J_z=0,25$ e $J_{xy}=0,2$ direção horizontal. Zoom da figura 11, nos valores iniciais de $\frac{J_K}{t}$ (autor)	35
Figura 13 – Variação da correlação S^2 em função dos valores $J_z = 0,25$ e $J_{xy}=0,2$, ou seja Heisenberg-Kondo na direção horizontal e do valor de $\frac{J_K}{t}$ (autor)	36
Figura 14 – $J_z = 0,25$ e $J_{xy} = 0,2$ Heisenberg-Kondo na direção horizontal. Zoom da figura 13 para valores iniciais de $\frac{J_K}{t}$ (autor)	37
Figura 15 – $J_z=-0,2 = J_{xy}$ Heisenberg-Kondo isotrópico, com um elétron itinerante. Correlações D , F e S^2 variando em função do efeito Kondo dividido pela energia cinética do movimento dos elétrons de condução. (autor) .	38
Figura 16 – $J_z=-0,2 = J_{xy}$ Heisenberg-Kondo isotrópico. Zoom da figura 15 para os valores iniciais de $\frac{J_K}{t}$ (autor)	39
Figura 17 – $J_z=-0,2 = J_{xy}$ Heisenberg-Kondo isotrópico, com dois elétrons itinerantes. Correlações D , F e S^2 variando em função do efeito Kondo dividido pela energia cinética do movimento dos elétrons de condução (autor) .	40
Figura 18 – $J_z=-0,2 = J_{xy}$ Heisenberg-Kondo isotrópico. Zoom da figura 17 para os valores iniciais de $\frac{J_K}{t}$ (autor)	41

Figura 19 – $J_z=-0,2 = J_{xy}$ Heisenberg-Kondo isotrópico, com três elétrons itinerantes. Correlações D , F e S^2 variando em função do efeito Kondo dividido pela energia cinética do movimento dos elétrons de condução (autor)	42
Figura 20 – $J_z=-0,2 = J_{xy}$ Heisenberg-Kondo isotrópico. Zoom da figura 19 para os valores iniciais de $\frac{J_K}{t}$ (autor)	43
Figura 21 – Correlação D , para um, dois e três itinerantes com valores $J_z=-0,2 = J_{xy}$, ou seja Heisenberg-Kondo isotrópico (autor)	44
Figura 22 – Correlação D , para um, dois e três itinerantes com valores $J_z=-0,2 = J_{xy}$, ou seja Heisenberg-Kondo isotrópico. Zoom da figura 21 nos valores iniciais de $\frac{J_K}{t}$ (autor)	45
Figura 23 – Correlação F , para um, dois e três itinerantes com valores $J_z=-0,2 = J_{xy}$, ou seja Heisenberg-Kondo isotrópico (autor)	46
Figura 24 – Correlação F , para um, dois e três itinerantes com valores $J_z=-0,2 = J_{xy}$, ou seja Heisenberg-Kondo isotrópico. Zoom da figura 23 nos valores iniciais de $\frac{J_K}{t}$ (autor)	47
Figura 25 – Correlação S^2 , para um, dois e três itinerantes com valores $J_z=-0,2 = J_{xy}$, ou seja Heisenberg-Kondo isotrópico com interação de troca antiferromagnético (autor)	48
Figura 26 – Correlação S^2 , para um, dois e três itinerantes com valores $J_z=-0,2 = J_{xy}$, ou seja Heisenberg-Kondo isotrópico. Zoom da figura 25 nos valores iniciais de $\frac{J_K}{t}$ (autor)	49
Figura 27 – Comportamento das correlações D , F e S^2 , com interação de troca antiferromagnético Heisenberg-Kondo isotrópico, em função da temperatura com efeito Kondo constante igual a 300 em um sistema com 1 elétron itinerante (autor)	50
Figura 28 – com 1 itinerante zoom (autor)	51
Figura 29 – Variação das correlações, em estado antiferromagnético Heisenberg-Kondo isotrópico, em função da temperatura com efeito Kondo constante igual a 0,01, próximo de zero, em um sistema com 1 elétron itinerante (autor)	52
Figura 30 – Zoom da figura 29 com os valores pequenos de temperatura (autor)	53
Figura 31 – $O_{(1)(2)}$ em função da temperatura (gerado no site < https://www.geogebra.org >)	65
Figura 32 – $O_{(1)(2)}$ em função da temperatura para 3 spins (gerado no site < https://www.geogebra.org >)	67

Lista de tabelas

Tabela 1	–	Tabela dos estados com 1 spin itinerante	22
Tabela 2	–	Valores de s_T por número de itinerantes na interação antiferromagnética	25
Tabela 3	–	Valores de S^2 por número de itinerantes na interação ferromagnética	27
Tabela 4	–	Valores de S^2 por número de itinerantes na interação antiferromagnética	27

1 Introdução

As propriedades magnéticas da matéria sólida têm origem na escala atômica e molecular. Nesta escala os elétrons e íons atômicos são os entes físicos fundamentais. Eles podem ser tratados como unidades (*partículas*) em uma teoria física que se disponha a descrever diferentes fenômenos como paramagnetismo, ferromagnetismo, antiferromagnetismo, etc. Esta teoria deve considerar: a) a capacidade destas unidades interagirem entre si devido às suas massas, cargas elétricas, momentos angulares, spins e momentos magnéticos; b) a distância entre as partículas e a disposição espacial (rede cristalina ou amorfa); c) a quantidade enorme destes constituintes (da ordem de 10^{23} unidades) e (d) que as interações características de distâncias tão pequenas (da ordem de $10^{-9}m$) devem obedecer às Leis da Mecânica Quântica.

Infelizmente uma abordagem teórica com o uso destas premissas (método *ab initio*), não permite encontrar uma solução exata na maior parte das vezes. Por isso utilizam-se abordagens simplificadoras que permitem, pelo menos, uma compreensão parcial do magnetismo dos corpos materiais. Uma destas abordagens é o *modelo de spins*, método que consiste em propor um sistema constituído de elétrons em uma configuração espacial parecida com o sistema físico real que se deseja investigar, e com interações simplificadas entre os elétrons (1).

Como exemplo desta abordagem teórica simplificada, considere o *grafeno*, alótropo do elemento químico carbono: ele é uma rede cristalina bidimensional do tipo *honeycomb*, que apresenta alta condutividade elétrica e propriedades magnéticas com possíveis aplicações tecnológicas (2). Podemos imaginar como ponto de partida para o estudo teórico um modelo simplificado constituído por um *cluster* com seis átomos dispostos na forma de um hexágono - figura 1.

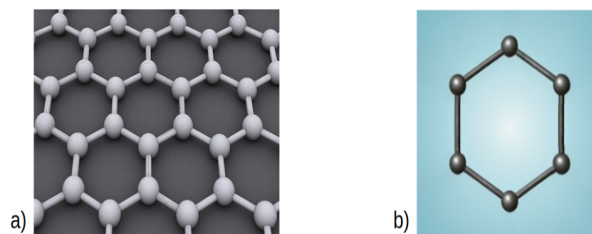


Figura 1 – (a) Ilustração do grafeno - Fonte: (autor). (b) Ilustração do cluster hexagonal - Fonte: (autor)

Nesta dissertação analisamos um *cluster* de seis átomos, em posições fixas denominadas de sítios (desconsidera-se a estrutura interna destes átomos). Cada sítio está

posicionado no vértice de um polígono de formato hexagonal - figura 1. Em cada sítio existe um elétron fixo e seu spin cria um momento magnético localizado, mas com orientação espacial livre. Além disso, neste *cluster* poderão existir elétrons móveis (itinerantes). Cada elétron itinerante também tem spin e momento magnético. Portanto, o sistema físico artificial que estudamos é um *cluster* hexagonal com um elétron fixo em cada vértice e com uma quantidade de elétrons itinerantes que arbitramos: um, dois ou três elétrons itinerantes.

As interações entre os elétrons deste *cluster* podem ser ferromagnética ou antiferromagnética. A interação ferromagnética favorece o alinhamento paralelo dos spins dos elétrons, reforçando o momento magnético total. Já a interação antiferromagnética induz a um alinhamento antiparalelo dos spins dos elétrons, podendo causar um desequilíbrio ou competição entre as várias partículas do sistema. Em nosso modelo, assumimos que a interação entre elétrons fixos pode ser ferromagnética ou antiferromagnética, mas a interação entre um elétron fixo e um elétron itinerante foi definida apenas como antiferromagnética.

A interação antiferromagnética entre elétrons localizados pode forçar a mudança na orientação dos spins. Se um dado elétron sofre a influência de outros elétrons vizinhos, pode haver uma competição entre estas interações, resultando em uma *frustração magnética* devido à orientação de seus spins (3). A frustração ocorre quando um momento magnético não consegue satisfazer todas as interações de maneira simultânea, devido à geometria da rede ou às propriedades das interações. Este fenômeno pode impedir que estados quânticos fiquem bem definidos, causando flutuação nos valores de energia e de spin total do sistema.

A interação antiferromagnética entre elétron localizado e elétron itinerante pode resultar em spin total zero nesta posição, eliminando a frustração magnética que porventura era causada neste sítio pelos elétrons nos sítios vizinhos. Esta interação, entre o elétron fixo e o elétron itinerante no mesmo sítio, é denominada *tipo Kondo* por se assemelhar ao Efeito Kondo de impurezas magnéticas em metais não-magnéticos (4, 5). O Efeito Kondo é um fenômeno que ocorre em sistemas onde momentos magnéticos localizados (como impurezas magnéticas em metais) interagem com os momentos de spin dos elétrons da banda de condução do metal, via mecanismos de *espalhamento* de partículas, podendo resultar na anulação total do momento magnético da impureza. Esse efeito tem implicações para as propriedades elétricas e magnéticas do metal em baixas temperaturas.

Foram usados dois tipos de hamiltonianos para modelar este sistema artificial: hamiltoniano tipo Ising-Kondo e hamiltoniano tipo Heisenberg-Kondo. Este sistema está com uma temperatura pré-definida e existem parâmetros cujos valores determinam as intensidades das interações entre spins, e se elas são do tipo ferro ou antiferromagnéticas. Por isso o modelo permite várias configurações físicas possíveis.

Como a quantidade de estados quânticos do sistema é muito grande, os hamiltonianos foram solucionados numericamente usando um código computacional, com o

auxílio do método de Lanczos, na maior parte das vezes. Foram determinadas correlações (médias estatísticas no ensemble canônico) entre os spins localizados e itinerantes do *cluster*. A correlação total entre os spins localizados (D), a correlação total entre spins localizados e itinerantes (F) e o valor esperado do spin total (S^2) foram determinadas para várias configurações diferentes. Nas situações possíveis, cálculos analíticos foram realizados para validação dos resultados numéricos. A análise dos resultados apresenta a riqueza de fenômenos causada pela reforço e/ou competição entre frustração magnética e Efeito Kondo, além da importância da paridade do número de elétrons itinerantes em determinadas situações.

Esta dissertação apresenta a seguinte estrutura: no capítulo 2 relatamos os objetivos deste projeto de pesquisa; no capítulo 3 descrevemos conceitos físicos abordados: as interações magnéticas entre os elétrons fixos e itinerantes, a frustração magnética, o efeito Kondo e os hamiltonianos de spins utilizados; no capítulo 4 apresentamos a metodologia utilizada, o programa computacional, as correlações e as definições magnéticas usadas; no capítulo 5 apresentamos os resultados obtidos; no capítulo 6 apresentamos as conclusões. Em anexo, abordamos o cálculo, para apenas 2 e 3 elétrons, da interação localizada D em função da energia, as bibliotecas do Fortran utilizadas no programa computacional, os equipamentos onde foram executados o programa e o método de Lanczos usado na diagonalização das matrizes que representam os hamiltonianos junto com sua demonstração.

2 Objetivos

O objetivo geral deste projeto de pesquisa é estudar as interações ferro e antiferromagnéticas em um *cluster* hexagonal de spins localizados e itinerantes e, conseqüentemente, observar como a frustração magnética, o efeito Kondo e a temperatura afetam as correlações entre os spins deste sistema. Para atingir este objetivo usaremos a Mecânica Estatística para um sistema físico em banho térmico (ensemble canônico) e determinaremos os seguintes objetivos específicos: (i) a correlação total entre spins localizados (D), (ii) a correlação total entre spins localizados e itinerantes (F), (iii) o valor esperado do spin quadrado total S^2 , (iv) o comportamento destas grandezas com a variação da intensidade da interação antiferromagnética entre spins localizados e itinerantes, e (v) o comportamento destas grandezas com a variação da temperatura.

3 Teoria

3.1 Propriedades magnéticas intrínsecas da matéria.

Segundo a Mecânica Quântica, elétrons são partículas idênticas indistinguíveis com spin semi-inteiro ($1/2$) e por isso são identificados como férmions. Logo a interação entre elétrons é determinada basicamente por dois fatores: a repulsão eletrostática e pelo Princípio de Exclusão de Pauli, que impede férmions idênticos de ocuparem o mesmo estado quântico. Sistemas físicos com mais de uma partícula em geral não apresentam uma descrição analítica, pois as numerosas interações tornam o problema quase impossível de ser solucionado. Uma alternativa é tentar compreender as propriedades coletivas das partículas, como frustração magnética, efeito Kondo, etc. Indicamos como referência o artigo de Campo et al (6) para revisão sobre comportamento de elétrons em átomos e moléculas.

O estudo do magnetismo busca compreender as propriedades e as interações magnéticas. Materiais que apresentam momentos magnéticos permanentes são ditos magnéticos e sua ordem, de longo alcance, pode se manifestar espontaneamente devido às interações de troca. Essas interações podem ser de curto alcance, diretas, ou de longo alcance, indiretas, como vistas nas págs. 16 a 19 de Nascimento(7).

A depender do tipo de interação e da estrutura do material, podem surgir diferentes fases magnéticas, tais como:

- **Ferromagnetismo:** caracterizado pelo alinhamento paralelo dos momentos magnéticos.
- **Antiferromagnetismo:** em que os momentos se alinham antiparalelamente, anulando a magnetização total.
- **Paramagnetismo:** na ausência de campo externo, os momentos estão desordenados e a magnetização resultante é nula.
- **Diamagnetismo:** associado à indução de correntes que se opõem ao campo magnético aplicado.

Em sistemas onde os graus de liberdade das interações magnéticas são incompatíveis com a estrutura cristalina podem-se originar fases exóticas, como o gelo de spin(8) e o líquido de spin(9). Nesta dissertação não apresentaremos resultados para fase paramagnética, diamagnética e estas fases exóticas.

3.1.1 Frustração magnética

No magnetismo o termo frustração refere-se à incapacidade dos spins de um sistema de encontrar uma orientação que condiz com os spins vizinhos. Ou seja, o mínimo da energia não corresponde ao mínimo de cada ligação (10).

A frustração magnética em dado ponto da rede pode ocorrer por duas razões diferentes: (i) interações ferromagnéticas e antiferromagnéticas simultâneas, que podem eventualmente competir neste ponto ou (ii) pela topologia da rede, com spins vizinhos em número ímpar e correlações antiferromagnéticas (11). Cada átomo no vértice de um *cluster* hexagonal possui dois vizinhos diretos, no *cluster*. Pequenas perturbações, como dopagem com elétrons itinerantes ou a introdução de defeitos, podem modificar substancialmente o comportamento magnético do sistema, induzindo transições de fase ou fenômenos correlacionados (12). Vide exemplo de frustração por topologia na figura 2.

3.1.2 Interação antiferromagnética

O princípio de exclusão de Pauli estabelece que dois elétrons não podem ocupar o mesmo estado quântico, ou seja, não podem ter os mesmos números quânticos. Logo, dois elétrons suficientemente próximos precisam ter números quânticos do componente z de spin contrários (13). Em cristais magnéticos iônicos, a interação entre os íons magnéticos é devida às interações de troca originadas da simetrização das funções de onda (14).

O hamiltoniano efetivo simplificado para interação entre os spins de dois íons magnéticos vizinhos é dado por:

$$\hat{H} = -J_M \sum_{\langle i,j \rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j \quad , \quad (1)$$

sendo que para $J_M < 0$ a energia do estado fundamental acontece quando os spins estão antiparalelos. Isto é denominado de acoplamento antiferromagnético.

Nesse cenário, a energia é minimizada quando os spins estão antiparalelos. No entanto, em estruturas como o grafeno, a geometria hexagonal pode impedir o anti-alinhamento perfeito de todos os pares, levando à frustração magnética quando consideramos interações entre primeiros e segundos vizinhos.

Em baixas temperaturas se dois spins sofrerem simultaneamente interações antiferromagnéticas ocorre o efeito de superposição. Quando essa superposição se espalha na rede podem ser gerados singletos, estados de spin zero, ou tripletos, estados de spin um, como consequência gerar o líquido de spin. Vale notar que um leve aumento de temperatura pode quebrar este estado de superposições e criar spins que flutuam livremente na rede.

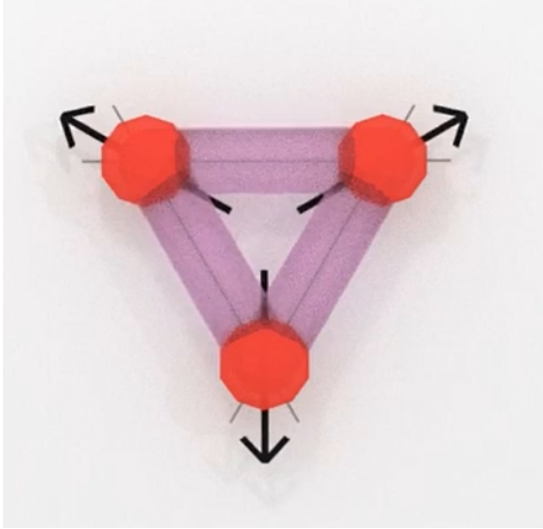


Figura 2 – frustração magnética
(15)

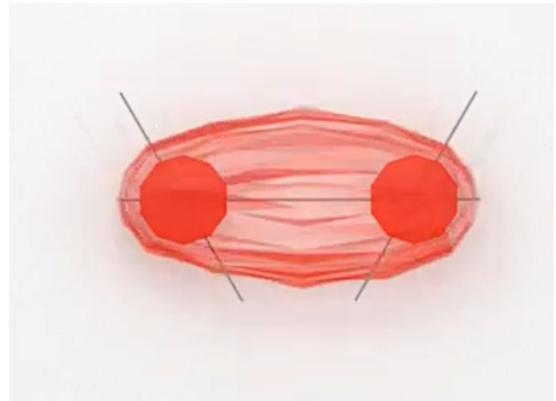


Figura 3 – singlete
(15)

3.1.3 Efeito Kondo

Esse fenômeno, estudado desde a década de 1930, foi explicado a partir de estudos teóricos realizados por Jun Kondo em 1964 (4, 5). Ele analisou a condutividade elétrica em metais não magnéticos, porém dopados com impurezas magnéticas. Kondo investigou a interação entre os elétrons da banda de condução (itinerantes) com a impureza magnética. O conjunto impureza e elétrons de condução tem seu spin total zerado e aumenta a seção de choque em relação a outros elétrons de condução. Portanto, a inserção de impurezas magnéticas em metais não magnéticos causa aumento da resistência elétrica em baixas temperaturas. Esse comportamento contrasta com o esperado para metais puros, onde a resistividade geralmente diminui com a redução da temperatura. O Efeito Kondo ocorre porque os elétrons itinerantes se acoplam à impureza magnética localizada, de forma que seus spins tendem a se anular, anulando os momentos magnéticos localizados. Esse efeito fornece explicações sobre anomalias na resistividade elétrica, calor específico, suscetibilidade magnética, entre outras propriedades físicas de ligas magnéticas diluídas em baixas temperaturas (16).

3.2 Hamiltonianos de Ising-Kondo e Heisenberg-Kondo

Nesta dissertação consideramos que cada sítio tem um elétron fixo e comporta no máximo dois elétrons itinerantes, desde que tenham spins antiparalelos. Admite-se que a interação entre um spin (elétron) fixo e um spin (elétron) itinerante causa spin total zero, e denominamos isso de *acoplamento Kondo* com amplitude $J_K > 0$.

Para representar a energia cinética, que é uma das parcelas do hamiltoniano total,

adicionamos um termo para indicar o “salto” do elétron de condução. O parâmetro t_{ij} é a quantidade de energia cinética do elétron itinerante para “saltar” entre os sítios vizinhos, como visto em Bittencourt pág. 34 (10). Na equação 2 apresentamos o termo de energia cinética no hamiltoniano do “salto”,

$$H_{\text{salto}} = - \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} t_{ij} (c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + c_{j\sigma}^\dagger c_{i\sigma}) , \quad (2)$$

onde $c_{j\sigma}$ ($c_{i\sigma}$) destrói o elétron itinerante com spin σ no sítio j (i) e $c_{i\sigma}^\dagger$ ($c_{j\sigma}^\dagger$) cria o elétron itinerante com spin σ no sítio i (j) com um custo de energia de valor t_{ij} . Assim, o resultado final é o *movimento* do elétron itinerante do sítio j (i) para o sítio i (j), não há troca de spin (preservação de σ). Por simplicidade vamos assumir $t_{ij} = t = 1$ constante. Este termo do hamiltoniano do “salto” é uma soma sobre todos os processos em que o elétron de condução “salta” entre sítios vizinhos i e j .

A interação entre o spin (elétron) localizado no sítio i e um spin (elétron) itinerante no mesmo sítio é representado pelo termo hamiltoniano do efeito Kondo, dado por:

$$H_{\text{Kondo}} = \sum_i J_K \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{s}_i , \quad (3)$$

onde $J_K > 0$ representa as interações de troca entre os spins dos elétrons localizados $\mathbf{S}_i$ e dos itinerantes $\mathbf{s}_i$. Este acoplamento é antiferromagnético. O Efeito Kondo pode ser explorado em sistemas físicos, magneticamente frustrados, onde a dopagem de elétrons reduz os efeitos de frustração que decorrem das interações geradas pelos momentos localizados, porque introduz interações de troca adicionais entre o spin itinerante e o spin localizado (17).

Estes dois termos juntos e acrescidos de um termo para interação entre os spins (elétrons) localizados resultam no hamiltoniano total do sistema. Para as interações magnéticas de troca entre os spins localizados foram adotados dois tipos de modelos: um com forte anisotropia em uma única direção e que denominamos de modelo de Ising-Kondo:

$$H_{IK} = -t \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} (c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + c_{j\sigma}^\dagger c_{i\sigma}) + J_K \sum_i \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{s}_i - J_z \sum_{\langle i,j \rangle} S_i^z S_j^z \quad (4)$$

e outro tridimensional, que denominamos de modelo de Heisenberg-Kondo:

$$H_{HK} = -t \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} (c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + c_{j\sigma}^\dagger c_{i\sigma}) + J_K \sum_i \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{s}_i - J_z \sum_{\langle i,j \rangle} S_i^z S_j^z - J_{xy} \sum_{\langle i,j \rangle} (S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y) , \quad (5)$$

no primeiro termo temos $c_{i\sigma}^\dagger, c_{j\sigma}^\dagger$ são operadores de criação e $c_{i\sigma}, c_{j\sigma}$ são operadores de destruição, com orientação σ , onde i e j estão em sítios próximos. A energia cinética do termo de Hopping, "salto", t_{ij} é simplificado pelo termo t .

No segundo termo temos o acoplamento Kondo, relacionando os spins itinerantes com os localizados em um mesmo sítio. O acoplamento é antiferromagnético, pois temos $J_K > 0$.

O terceiro termo é interação magnética entre os momentos localizados, no caso de Ising-Kondo é unidimensional e no de Heisenberg-Kondo é tridimensional (divididos em dois termos, onde definimos $J_M = J_z + J_{xy}$) (18).

Devido ao princípio de minimização da energia, o segundo termo nos hamiltonianos dos modelos adotados tem que ser antiferromagnético. Esse acoplamento gera uma nuvem eletrônica (nuvem Kondo) em torno do spin localizado, ocasionando uma blindagem magnética nesse spin (19).

3.3 Fenômenos magnéticos não usuais.

Os fenômenos magnéticos são bastante variados, e não temos a pretensão que os modelos simplificados usados nesta dissertação sejam capazes de reproduzir todos eles. Discutimos a seguir dois fenômenos que são citados na literatura: o Efeito RKKY e o Isolante de Mott. O detalhamento de tais conceitos não faz parte do escopo dessa dissertação e para maiores detalhes consultem a bibliografia citada.

O Efeito RKKY (Ruderman-Kittel-Kasuya-Yosida) é uma interação indireta entre momentos magnéticos localizados via elétrons de condução do material hospedeiro. É um fenômeno dito de longo alcance quando comparado às interações magnéticas diretas (20, 21).

O Isolante de Mott é um fenômeno da física da matéria condensada no qual um material que, segundo a teoria de bandas deveria ser um condutor elétrico, se comporta como um isolante elétrico devido a fortes interações eletrônicas. Na teoria de bandas tradicional, se uma banda eletrônica estiver parcialmente preenchida, o material deve conduzir eletricidade. No entanto, em alguns materiais, como no grafeno bicamada torcido, isso não acontece. Eles se tornam isolantes mesmo com bandas parcialmente preenchidas. (22)

4 Metodologia

Propriedades magnéticas do *cluster* hexagonal são determinadas por correlações espaciais dos momentos magnéticos, que em nosso caso são equivalentes às correlações entre os spins dos elétrons. A correlação total entre os momentos localizados e a correlação total entre os momentos localizados e os momentos itinerantes são afetadas pela densidade de elétrons itinerantes no *cluster*. Estas correlações são determinadas por médias estatísticas em que são usadas as energias dos autoestados quânticos do sistema físico. Por sua vez, o sistema físico é representado matematicamente por um hamiltoniano de spins escrito em linguagem de segunda quantização (operadores de criação e destruição de partículas). Nesta dissertação utilizamos dois hamiltonianos: Ising-Kondo e Heisenberg-Kondo. Qualquer que seja o hamiltoniano, é preciso escolher uma base de estados quânticos iniciais (vetores de base), escrever a matriz que representa o hamiltoniano, diagonalizar esta matriz para determinar autovalores e autovetores (autoestados), e usá-los para determinar as correlações entre os spins. Este processo é realizado computacionalmente por um código baseado em um construído para este problema pelo professor Fábio Zimmer - INFI/UFMS.

O programa computacional que utilizamos nesta dissertação realiza simulações de um *cluster* hexagonal de seis sítios, com variações de 0 a 3 elétrons itinerantes. A quantidade de memória computacional cresce exponencialmente com o número de elétrons itinerantes. Para os casos de um ou dois elétrons itinerantes foi possível executar o programa em notebook convencional. Para três elétrons itinerantes foi necessário usar um computador científico de grande porte (CENAPAD/Unicamp).

O método numérico utilizado para representar os momentos magnéticos localizados é a técnica conhecida como *base de Ising*, em que cada estado quântico é representado por uma cadeia (*string*) de bits, cada bit podendo ter valor 0 ou 1.

Alguns bits representam os estados dos spins dos elétrons localizados e, para estes bits, vale o código: bit 0 representa o spin localizado *down*, e bit 1 representa o spin localizado *up*. Os outros bits do *string* representam, em pares, os estados/posição dos elétrons itinerantes: no sítio que não há elétron itinerante seu respectivo par de bits será (00), se neste sítio houver um elétron itinerante com spin *down* seu par será (01) ou se for spin *up* seu par será (10) e (11) representa dois elétrons com os spins opostos.

Como nesta dissertação estamos interessados em estudar o *cluster* hexagonal com a presença de elétrons itinerantes, geramos uma base de estados quânticos que represente todos os possíveis estados de spin no sistema. Para o caso do *cluster* hexagonal ($N = 6$) com um elétron itinerante, o número de estados de spin possíveis é $2^N \times 2N$, onde 2^N é o número de estados para os spins localizados se não houvesse o itinerante e $2N$ a

degenerescência causada pelo spin do elétron itinerante em cada um dos sítios. Este caso de *cluster* hexagonal com um elétron itinerante usa uma *string* de 18 bits: $b_{17}...b_1b_0$. Os bits nas posições de 0 a 5 (da direita para a esquerda) representam as configurações dos spins localizados. Os demais bits são agrupados em pares para representar os possíveis estados do spin itinerante em cada sítio. Assim a matriz que representa o hamiltoniano, para um elétron itinerante, tem tamanho da ordem de $2 \times 6 \times 2^6$. O acréscimo de mais elétrons itinerantes no *cluster* hexagonal aumenta rapidamente o tamanho da matriz.

Com os resultados numéricos foram produzidos gráficos para análise do comportamento do sistema em função da intensidade da interação tipo Kondo entre os elétrons fixos e os elétrons itinerantes. Entre outras conclusões, observa-se que no regime antiferromagnético entre os spins localizados, as correlações entre os spins modificam-se conforme a quantidade de elétrons itinerantes e a intensidade do acoplamento Kondo.

,

Estudamos sistemas magneticamente frustrados com interação Kondo em um *cluster* hexagonal, ou seja, seis elétrons localizados e até três elétrons itinerantes. Obtivemos as correlações entre os momentos localizados D , entre o momento localizado e o momento itinerante F , e o momento quadrado total S^2 . Utilizamos os modelos de Ising-Kondo, útil por sua simplicidade, devido à anisotropia no qual os momentos localizados se alinham em uma direção, nele consideram-se apenas interações de curto alcance entre os spins. O outro modelo é o de Heisenberg-Kondo, mais completo, que considera três dimensões e uma troca isotrópica. Em ambos os casos recorreremos ao cálculo numérico computacional.

4.1 Estrutura do programa

No código do programa, para 6 localizados, representamos inicialmente os valores dos spins dos elétrons através de *strings* sendo 18 strings as 6 primeiras, da direita para a esquerda, os spins localizados, sendo 1 para spin *up* e 0 para spin *down*, e as outras strings são representações dos spins itinerantes agrupados em pares, da forma $s_{17}s_{16}...s_5s_4s_3s_2s_1s_0$. As partes da *string* correspondente ao itinerante tomam valores de 1 ou 0, mas possui significado distinto do localizado. A tabela 1 representa, à frente do estado de base a *string* correspondente a cada estado.

Na tabela, para os elétrons localizados, temos 1 spin *up*, ($\uparrow$), e 0 spin *down*, ($\downarrow$) sendo 6 spins, um para cada vértice do hexágono, a forma do *cluster*.

Já para elétrons itinerantes temos 6 sítios cada um comportando até 2 elétrons, desde que tenham spins opostos, pelo princípio de exclusão de Pauli. Logo temos (10) spin up ($\uparrow$) e (01) spin down ($\downarrow$) e caso exista mais de um elétron itinerante no sítio, (11) representa os spins opostos ($\uparrow\downarrow$) ou ($\downarrow\uparrow$), enquanto (00) é a ausência de spins.

Estados de base	sítio 1	sítio 2	sítio 3	sítio 4	sítio 5	sítio 6	Localizados
$ 0\rangle$	00	00	00	00	00	01	000000
$ 1\rangle$	00	00	00	00	00	10	000000
$ 2\rangle$	00	00	00	00	01	00	000000
$::$	$::$	$::$	$::$	$::$	$::$	$::$	$::$
$::$	$::$	$::$	$::$	$::$	$::$	$::$	$::$
$ 766\rangle$	01	00	00	00	00	00	111111
$ 767\rangle$	10	00	00	00	00	00	111111

Tabela 1 – Tabela dos estados com 1 spin itinerante

Assim o programa associa cada estado a um número binário e este por sua vez é associado a um número decimal.

Para encontrar o tamanho da base calculamos o número de possíveis estados localizados 2^{n_s} , onde n_s é o número de localizados, e a potência 2 vêm do fato de que eles assumem 2 valores possíveis: 0 ou 1. E por fim calculamos as possibilidades dos spins itinerantes, ou seja, a combinatória de $2n_s$ posições (2 por cada sítio sendo n_s o número de sítios), pelo número de itinerantes n_e : $2^{n_s} * C(2n_s, n_e)$. Assim para calcular o número de estados (N) temos a fórmula:

$$N = 2^{n_s} \cdot \frac{(2n_s)!}{(2n_s - n_e)! \cdot n_e!} \quad , \quad (6)$$

onde n_s é a quantidade de elétrons localizados, no nosso caso 6, e n_e a quantidade de elétrons itinerantes. Desse modo o aumento dos estados, aumentando os elétrons itinerantes, é exponencial, o que dificulta a obtenção de resultados para mais de 2 elétrons itinerantes.

Durante o desenvolvimento desta dissertação, foram utilizadas as ferramentas de inteligência artificial ChatGPT, desenvolvida pela OpenAI, com o objetivo de auxiliar na elaboração e revisão de trechos textuais e esclarecimento de conceitos teóricos e gramaticais relacionados ao tema abordado. Utilizamos a interface disponível em <<https://chat.openai.com>>, versão disponível plus em julho de 2025. Ainda foi utilizada para organizar as fontes disponíveis a ferramenta GOOGLE NotebookLM disponível em: <<https://notebooklm.google/>>. Acesso em: 31 Agosto de 2025. Todas as contribuições das ferramentas foram criteriosamente revisadas, adaptadas e validadas pelo autor, de forma a garantir a originalidade, a correção científica e a conformidade com os objetivos do trabalho acadêmico.

As simulações computacionais, para 2 e 3 elétrons itinerantes, foram realizadas utilizando os recursos do Centro Nacional de Processamento de Alto Desempenho (CENAPAD), especificamente o CENAPAD-SP, vinculado à Universidade Estadual de Campinas (UNICAMP).

4.2 Programa computacional

Para resolver o problema foi desenvolvido um programa em Fortran 90 tendo como base o algoritmo do professor Dr. Fábio Mallmann Zimmer (professor da UFMS), seguindo o esquema da figura 4.

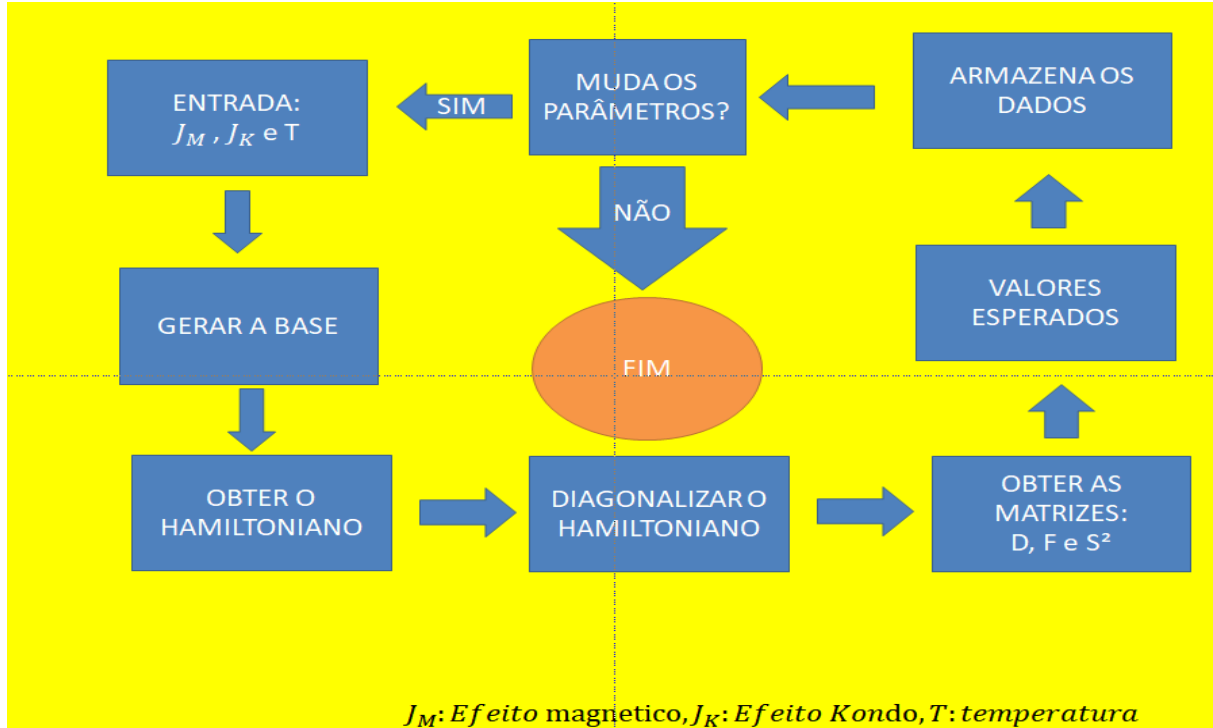


Figura 4 – Esquema do algoritmo

A diagonalização do hamiltoniano foi feita através das bibliotecas do Fortran Lapack e Blas, (abordadas no anexo), pelo método de Lanczos. Onde D é a correlação de elétrons localizados, F a interação entre os momentos localizados e itinerantes, S^2 o spin quadrado total. Os valores esperados são referentes a D , F , S^2 e a energia, que são calculados durante o processo. A interação Kondo é um laço interno que relaciona os valores esperados.

Foi observado que alterando a ordem das bases podemos obter uma matriz bloco diagonal, facilitando os cálculos de autovalores e autovetores que representam as interações e os autoestados respectivamente.

Os gráficos apresentados no corpo da dissertação, salvo indicação em contrário, foram plotados no LibreOffice versão 25.2.5.2 (X86_64).

4.3 Correlações das grandezas físicas

Para os cálculos a seguir consideramos o valor esperado de um observável A , dado por (19):

$$\langle A \rangle = \frac{1}{Z} \cdot \text{Tr}(Ae^{-\beta H}) \quad , \quad (7)$$

sendo $Z = \text{Tr}(e^{-\beta H})$ e $\beta = \frac{1}{k_B T}$, Tr significa o *traço* (soma dos elementos da diagonal da matriz que representa o operador hamiltoniano), T temperatura e k_B a constante de Boltzmann. Os cálculos dos valores esperados são:

$$D_{ij} = \langle \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j \rangle \quad , \quad (8)$$

$$F_{il} = \langle \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{s}_l \rangle \quad , \quad (9)$$

onde $i = 1, \dots, n_s$, $j = 1, \dots, n_s$, $l = 1, \dots, n_e$ (n_s é o número de elétrons fixos e n_e é o número de elétrons itinerantes).

O valor esperado do spin quadrado total é obtido multiplicando:

$$\mathbf{S}^2 = \left(\sum_i \mathbf{S}_i + \sum_l \mathbf{s}_l \right)^2 \quad , \quad (10)$$

logo:

$$\langle \mathbf{S}^2 \rangle = \langle \sum_i \mathbf{S}_i^2 \rangle + \langle \sum_l \mathbf{s}_l^2 \rangle + \langle 2 \sum_{i,l} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{s}_l + 2 \sum_{i<j} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j + 2 \sum_{l<p} \mathbf{s}_l \cdot \mathbf{s}_p \rangle \quad , \quad (11)$$

sendo $p = 1, \dots, n_e$.

Desconsiderando a interação entre spins itinerantes em sítios diferentes, por ser considerada de valores muito baixos, temos a expressão:

$$S^2 = \sum_{\tilde{n}_s} \langle S_{\tilde{n}_s}^2 \rangle + \sum_{\tilde{n}_e} \langle s_{\tilde{n}_e}^2 \rangle + 2(D + F) \quad , \quad (12)$$

onde $\tilde{n}_s$ é o contador de elétrons localizados, varia de 1 a n_s , e $\tilde{n}_e$ é o contador de elétrons itinerantes, varia de 1 a n_e .

$$D = \sum_{i<j} D_{ij} \quad e \quad F = \sum_{i,l} F_{il} \quad , \quad (13)$$

no anexo A segue o método de cálculo de D para dois e três spins em função da energia e temperatura.

Para simplificar os cálculos adotaremos como 1 os valores da constante de Boltzman e $\hbar$.

4.4 Valor de D em função de J_M

Para determinar o valor exato de D em função de J_M , para o limite de $\frac{J_K}{t}$ no infinito, recorreremos à fórmula (28) e à relação (31). onde as iterações dos spins itinerantes tendem à zero. Temos que:

$$S^2 = \sum_{\tilde{n}_s} \langle S_{\tilde{n}_s}^2 \rangle + 2D \quad , \quad (14)$$

de onde podemos deduzir que a relação é:

$$D = \frac{1}{2} \left(s_T(s_T + 1) - \frac{3}{4} \cdot n_r \right) \quad , \quad (15)$$

onde s_T , spin total do sistema, varia de acordo com a interação e a geometria e n_r é a diferença entre o total de spins, no nosso caso 6, e o número de spins itinerantes (23).

Se $J_M > 0$, logo **ferromagnético**, é possível satisfazer todos os pares simultaneamente: basta alinhar todos os spins. Temos um estado totalmente polarizado que tem spin total máximo de $s_T = \frac{n_r}{2}$, logo $D = \frac{1}{2} \left(\frac{n_r}{2} \left(\frac{n_r}{2} + 1 \right) - \frac{3}{4} \cdot n_r \right) = \frac{n_r(n_r-1)}{8}$.

Deste modo após o acoplamento, $\frac{J_K}{t}$ tendendo ao infinito segue que para 0 itinerante temos $D = 3,75$. Para 1 itinerante $D = 2,5$. Para 2 itinerantes temos $D = 1,5$. Por fim, para 3 itinerantes temos $D = 0,75$.

Para a interação **antiferromagnética**, $J_M < 0$, cada par tenta ser singleto, mas nem todos podem, devido a restrições quânticas (monogamia do emaranhamento) e/ou geometria da rede. Deste modo, para os spins resultantes pós acoplamento, $\frac{J_K}{t}$ tendendo ao infinito, temos o comportamento de acordo com suas frustrações cada qual valendo $\frac{1}{2}$. Ou seja se o número de spins livres for par s_T vai ser 0, se for ímpar e cada spin frustrado valerá $\frac{1}{2}$, como podemos ver na tabela abaixo.

Tabela 2 – Valores de s_T por número de itinerantes na interação antiferromagnética

nº de itinerantes	s_T
0 itinerante	0
1 itinerante	$\frac{1}{2}$
2 itinerantes	0
3 itinerantes	$\frac{3}{2}$

4.5 Valor de F

Para $\frac{J_K}{t}$ tendendo ao infinito tendendo ao infinito segue a análise.

Para 0 itinerante o valor de F será sempre zero, pois não existe interação entre spins localizados e itinerantes.

Para 1 itinerante o valor de F no sítio i , deduzidos da pg. 412 de Lacroix e das págs. 15 a 17 de Júnior(3, 17);

$$F_i \equiv F_{i1} = \langle \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{s}_1 \rangle = \langle S_i^x s_1^x + S_i^y s_1^y + S_i^z s_1^z \rangle \quad . \quad (16)$$

$$F_{z,i} = \langle S_i^z s_i^z \rangle \quad , \quad (17)$$

$$F_{xy,i} = \langle S_i^x s_i^x + S_i^y s_i^y \rangle \quad , \quad (18)$$

calculando 18 pelas equações 33 temos:

$$S_i^x s_i^x = \frac{1}{4}(S^+ + S^-)(s^+ + s^-) \quad e \quad S_i^y s_i^y = \frac{-1}{4}(S^+ - S^-)(s^+ - s^-) \quad , \quad (19)$$

$$F_{xy,i} = \mathbf{S}_i^x \cdot \mathbf{s}_i^x + \mathbf{S}_i^y \cdot \mathbf{s}_i^y = \frac{1}{4}(S^+ + S^-)(s^+ + s^-) + \frac{-1}{4}(S^+ - S^-)(s^+ - s^-) \quad , \quad (20)$$

logo

$$F_{xy,i} = \frac{1}{2}(S^+ s^- + S^- s^+) \quad , \quad (21)$$

e portanto:

$$F_i = \langle F_{z,i} + F_{xy,i} \rangle \quad , \quad (22)$$

aplicamos no singleto-Kondo $\frac{\uparrow\downarrow - \downarrow\uparrow}{\sqrt{2}}$, logo:

$$F_i = \langle \frac{\uparrow\downarrow - \downarrow\uparrow}{\sqrt{2}} | S^z s^z + S^x s^x + S^y s^y | \frac{\uparrow\downarrow - \downarrow\uparrow}{\sqrt{2}} \rangle \quad , \quad (23)$$

assim, temos três partes:

$$\langle \frac{\uparrow\downarrow - \downarrow\uparrow}{\sqrt{2}} | S^z s^z | \frac{\uparrow\downarrow - \downarrow\uparrow}{\sqrt{2}} \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \langle \frac{\uparrow\downarrow - \downarrow\uparrow}{\sqrt{2}} | | -\frac{\uparrow\downarrow}{4} + \frac{\downarrow\uparrow}{4} \rangle = \frac{1}{2} \left(\frac{-1}{4} - \frac{1}{4} \right) = \frac{-1}{4} \quad ; \quad (24)$$

$$\langle \frac{\uparrow\downarrow - \downarrow\uparrow}{\sqrt{2}} | S^+ s^- | \frac{\uparrow\downarrow - \downarrow\uparrow}{\sqrt{2}} \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \langle \frac{\uparrow\downarrow - \downarrow\uparrow}{\sqrt{2}} | | -\uparrow\downarrow \rangle = \frac{-1}{2} \quad ; \quad (25)$$

$$\langle \frac{\uparrow\downarrow - \downarrow\uparrow}{\sqrt{2}} | S^- s^+ | \frac{\uparrow\downarrow - \downarrow\uparrow}{\sqrt{2}} \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \langle \frac{\uparrow\downarrow - \downarrow\uparrow}{\sqrt{2}} | | \downarrow\uparrow \rangle = \frac{-1}{2} \quad , \quad (26)$$

somando(24)(25) e (26) temos:

$$F_i = \frac{-1}{4} + \frac{1}{2} \left(\frac{-1}{2} + \frac{-1}{2} \right) = \frac{-3}{4} = -0,75 \quad . \quad (27)$$

Assim para 1 itinerante existe uma única interação F_i , logo a soma será -0,75.

Para 2 itinerantes, temos dois valores a serem somados, logo o valor será o dobro da energia máxima para estabilizar o sistema $F = F_{i1} + F_{i2} = -1,5$.

Para 3 itinerantes, temos três valores a serem somados, logo o valor será o triplo da energia máxima para estabilizar o sistema $F = F_{i1} + F_{i2} + F_{i3} = -2,25$.

4.6 Valor de S^2

De acordo com a equação 28 temos

$$S^2 = \sum_{\tilde{n}_s} \langle S_{\tilde{n}_s}^2 \rangle + \sum_{\tilde{n}_e} \langle S_{\tilde{n}_e}^2 \rangle + 2(D + F) \quad , \quad (28)$$

e assim chegamos na expressão

$$S^2 = 6 * \frac{3}{4} + n_e * \frac{3}{4} + 2(D + F) \quad . \quad (29)$$

Utilizando os possíveis valores de D e F , abordados nas seções 4.4 e 4.5, temos as seguintes tabelas de valores para S^2 :

Tabela 3 – Valores de S^2 por número de itinerantes na interação **ferromagnética**

nº de itinerantes	S^2
0 itinerante	12
1 itinerante	8,75
2 itinerantes	6
3 itinerantes	3,75

Tabela 4 – Valores de S^2 por número de itinerantes na interação **antiferromagnética**

nº de itinerantes	S^2
0 itinerante	0
1 itinerante	0,75
2 itinerantes	0
3 itinerantes	3,75

Importante ressaltar que os resultados acima são válidos para o caso assintótico $J_K \rightarrow +\infty$, isto é, a interação antiferromagnética entre spin localizado e spin itinerante prepondera sobre a interação entre spins localizados, qualquer que seja ela.

4.7 Definições magnéticas (análise de J_M)

Não há relação entre os estados fundamentais do ferromagneto e do antiferromagneto. O significado disso fica mais claro se considerarmos um modelo de Heisenberg-Kondo:

Se $J_{xy} = 0$ e $J_z > 0$ reduzimos ao modelo de Ising-Kondo (24).

Se $|J_z| = |J_{xy}|$ temos o modelo de Heisenberg-Kondo isotrópico. Todos os componentes do spin interagem igualmente. Ver pág. 54 de Troyer(24).

Se $|J_z| > |J_{xy}|$ a ordem, quando ocorre, é na direção z . Ver na pág. 2 de Schindelin(25).

Se $|J_{xy}| > |J_z|$ todas as direções estão no plano xy e correlações na direção z são de curto alcance. Ver na págs. 2-3 de Fornoville(26).

Tomando $J_M = J_z + J_{xy}$, temos, devido ao sinal, que para $J_M > 0$ interação ferromagnética e para $J_M < 0$ interação antiferromagnética.

Dado que a matriz hamiltoniana é esparsa, grande e simétrica, utilizou-se o método de Lanczos visando tridiagonalizar a matriz, facilitando a sua manipulação e posterior obtenção dos autovalores e autovetores utilizados no escopo do programa. O método de Lanczos e sua demonstração constam em anexo neste trabalho.

5 Resultados

Neste capítulo, como já dito anteriormente, apresentamos os resultados numéricos, com o objetivo de simplificar as informações, adotamos como 1 os valores de $\hbar$, constante de Plank, e k_B , constante de Boltzmann.

Inicialmente vamos apresentar o resultado para 1 itinerante sem interações de troca, ou seja $J_z = 0 = J_{xy}$. A seguir vamos apresentar os gráficos com interação ferromagnética do tipo Ising-Kondo para o valor de $J_z = 0,2$ e $J_{xy} = 0$.

Em sequência apresentaremos, para os valores de $J_M = 0,45$ as correlações D , F e S^2 de 0 a 3 itinerantes.

Prosseguindo iremos abordar as interações de troca antiferromagnéticas, para o modelo isotrópico de valor $J_M = -0,4$ tanto para os momentos de D , F e S^2 , como variando em 1, 2 e 3 elétrons itinerantes.

Para concluir, temos os gráficos da variação de temperatura com 1 elétron itinerante e efeito Kondo elevado ($\frac{J_K}{t} = 300$) e baixo ($\frac{J_K}{t} = 0,01$).

5.1 Sem interação de troca

Dizemos que a interação está sem interação de troca, ou seja, quando $J_z = 0 = J_{xy}$, ($J_M = 0$).

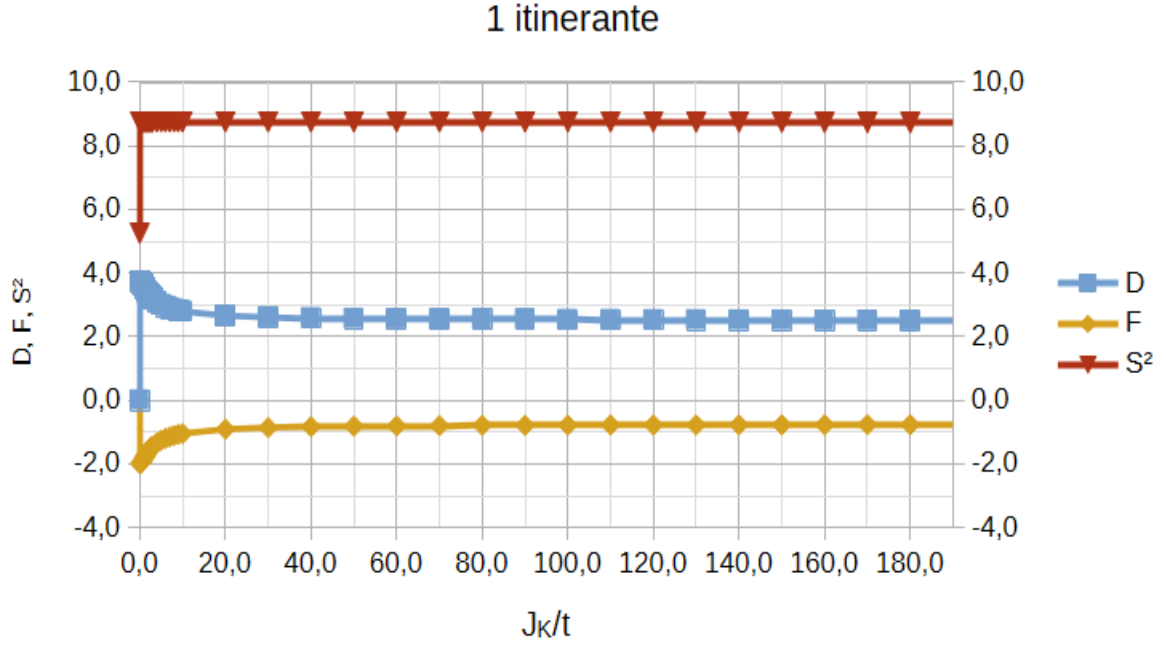


Figura 5 – Dependência das correlações entre spins em função da amplitude J_K normalizada pela energia cinética t , com parâmetros $J_z = 0 = J_{xy}$ (autor)

Na figura 5, temos um comportamento final idêntico ao comportamento das correlações ferromagnéticas, visto nos cálculos numéricos das seções 4.4, 4.5 e 4.6. Assim para valores de $\frac{J_K}{t}$ muito altos temos $D = 2,5$, $F = -0,75$ e $S^2 = 8,75$, para um itinerante.

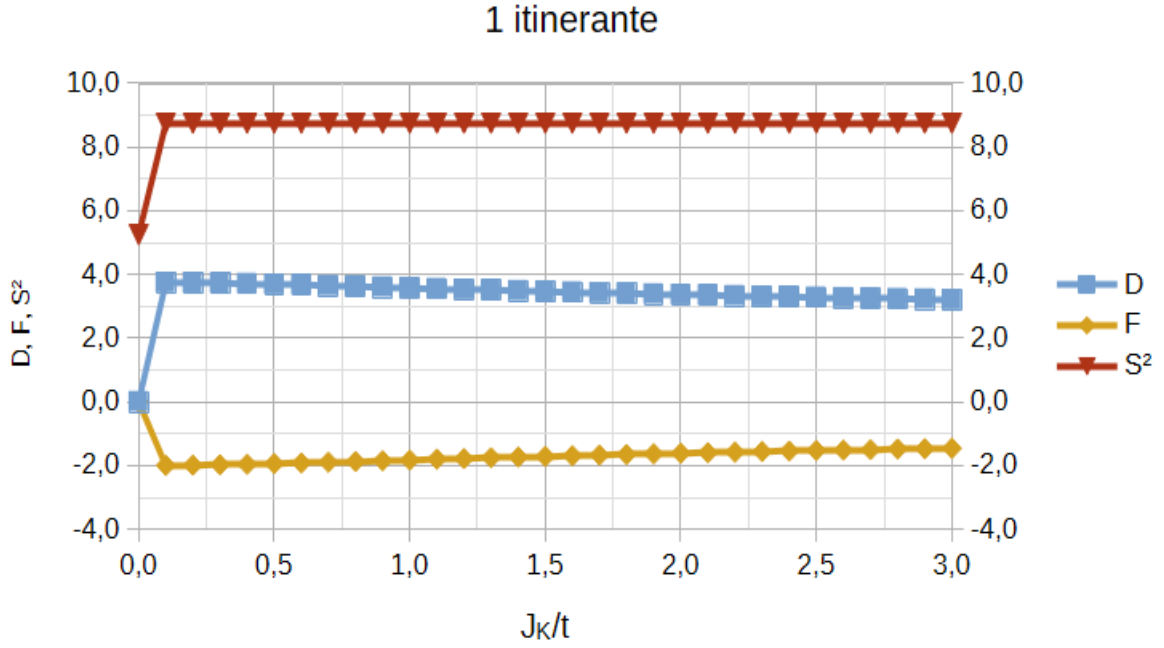


Figura 6 – $J_z = 0 = J_{xy}$ zoom da figura 5 nos valores iniciais de $\frac{J_K}{t}$ (autor)

Para J_k próximo a zero, figura 6 o elétron itinerante e os spins locais estão basicamente desacoplados, sem correlação, em completo estado de isolante de Mott.

Após um leve aumento do valor de $\frac{J_K}{t}$ formam-se picos que marcam a escala característica de Kondo, onde o elétron itinerante começa a formar um singlete local e, ao mesmo tempo, ainda “visita” virtualmente os outros sítios, gerando correlações extras e flutuações de spin acima do caso livre. A partir de $\frac{J_K}{t} = 0,5$ temos o singlete estabelecido, correlações e flutuações diminuem e se estabilizam em valores assintóticos, descritos acima.

5.2 Tipo Ising-Kondo

Dizemos que a interação é do tipo Ising-Kondo quando $J_{xy} = 0$ e $J_z > 0$.

A interação possui forte anisotropia. No exemplo apresentado a seguir figuras 7 e 8, utilizamos $J_z = 0,2$.

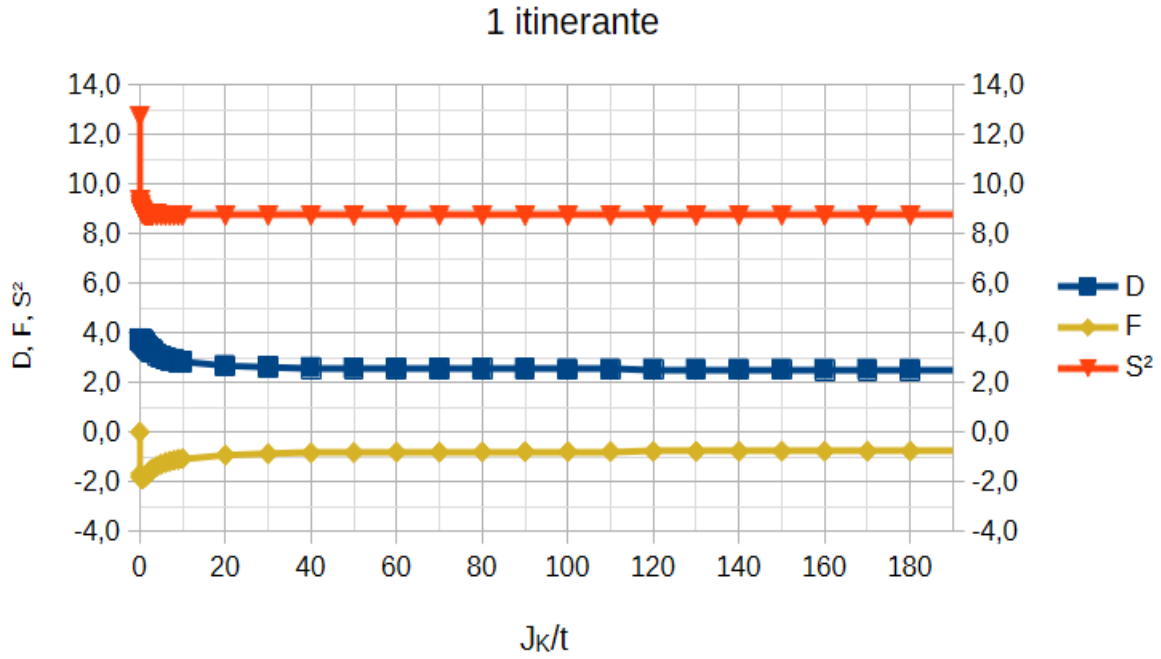


Figura 7 – $J_z=0,2$ e $J_{xy}=0$ Ising-Kondo. Variação das correlações D , F e S^2 em função de $\frac{J_K}{t}$ (autor)

O comportamento para valores de $\frac{J_K}{t}$ altos, figura 7, é idêntico ao caso anterior, ou seja ferromagnético assumindo valores de $D = 2,5$, $F = -0,75$ e $S^2 = 8,75$, para um itinerante.

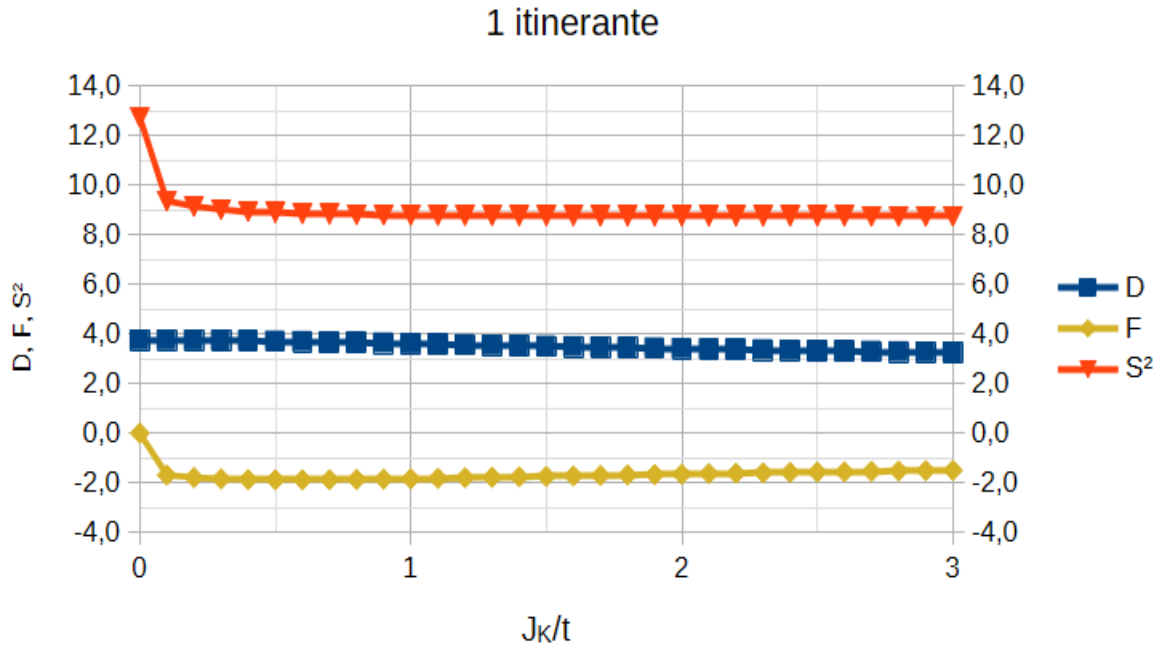


Figura 8 – $J_z=0,2$ e $J_{xy}=0$ Ising-Kondo zoom da figura 7 nos valores iniciais (autor)

Para valores de $\frac{J_K}{t}$ próximos de zero, figura 8, a correlação D inicia sem interação de troca, funcionando como se não houvesse itinerantes no sistema. Inicialmente o efeito RKKY compete com o efeito Kondo, mas devido às energias do modelo Ising-Kondo a correlação alcança o equilíbrio tendendo ao acoplamento. Já para a correlação F temos, para $\frac{J_K}{t}$ próximo a zero, o elétron itinerante e os spins locais estão basicamente desacoplados. Após um leve aumento do valor de

$$\frac{J_K}{t}$$

forma-se um pico negativo que marca a escala característica de Kondo.

Como vimos a diferença essencial entre o comportamento sem interação de troca e o modelo de Ising-Kondo se concentra nos valores iniciais, como veremos a seguir esse comportamento dos valores iniciais em Ising-Kondo será o mesmo para o sistema ferromagnético Heisenberg-Kondo.

5.3 Tipo Heisenberg-Kondo ferromagnético

Temos uma interação Heisenberg-Kondo ferromagnético quando $J_M > 0$, ou seja a soma $J_z + J_{xy} > 0$. No exemplo utilizamos $J_z = 0,25$ e $J_{xy} = 0,2$. Os valores abaixo, para altos valores de $\frac{J_K}{t}$ são calculados nas seções 4.4, 4.5 e 4.6. Portanto, apresentarei apenas os valores correspondentes.

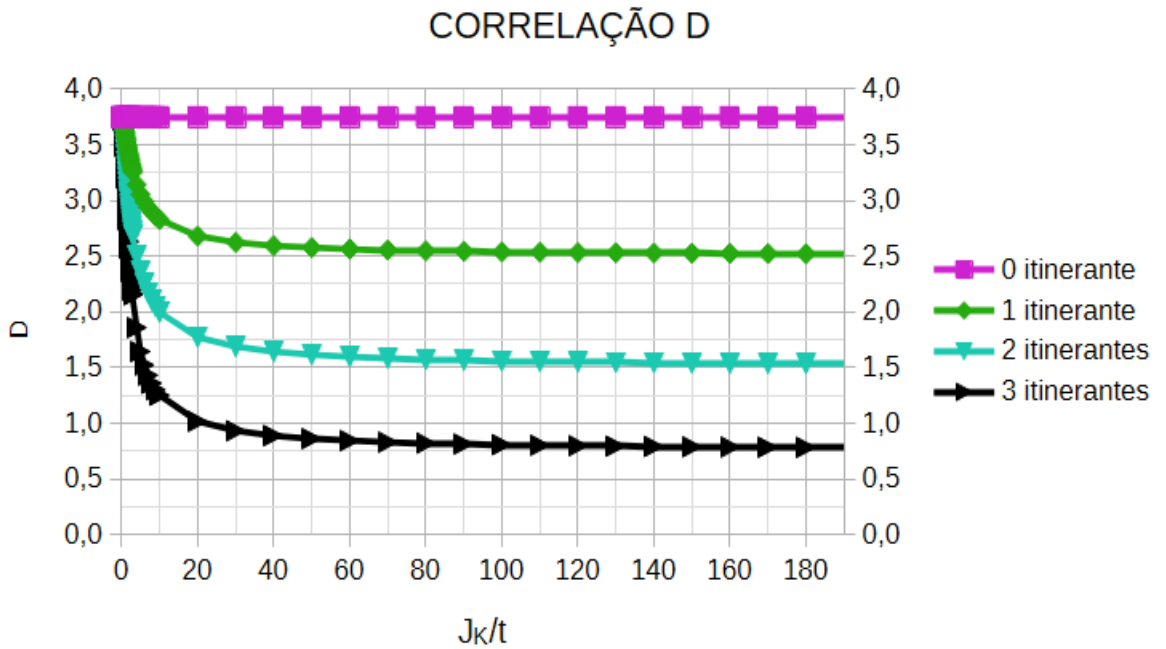


Figura 9 – As curvas representam a variação da correlação D de zero à três spins para os valores $J_z=0,25$ e $J_{xy}=0,2$ em função de $\frac{J_K}{t}$, logo uma interação Heisenberg-Kondo na direção horizontal. (autor)

Para valores altos de $\frac{J_K}{t}$, figura 9, temos uma correlação ferromagnética de onde, pela seção 4.4 obtemos os valores de D para zero itinerantes 3,75, um itinerante 2,5, dois itinerantes 1,5 e para três itinerantes 0,75.

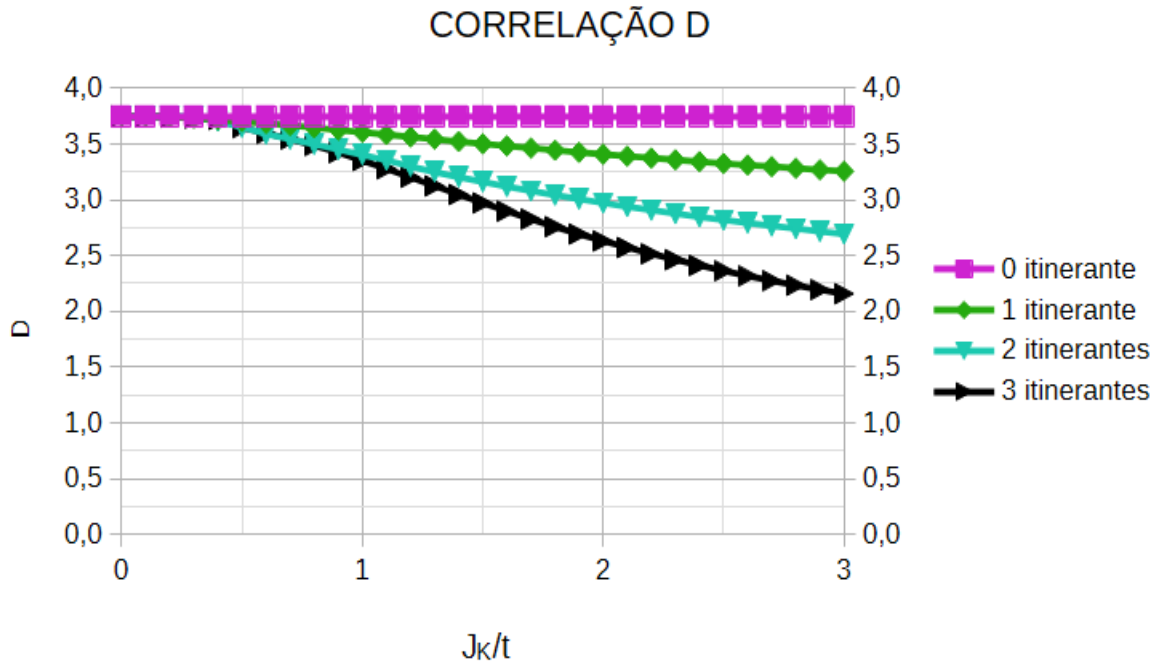


Figura 10 – $J_z=0,25$ e $J_{xy}=0,2$ Heisenberg-Kondo de direção horizontal. Zoom da figura 9, nos valores iniciais de $\frac{J_K}{t}$ (autor)

Para valores de $\frac{J_K}{t}$ próximos de zero, figura 10, temos os seis elétrons localizados, sem influência dos elétrons itinerantes obtendo assim o valor de 3,75. Após o valor $\frac{J_K}{t} = 0,5$ um decaimento à medida que os elétrons vão se acoplando, esses decaimentos são mais intensos à medida que temos mais elétrons itinerantes.

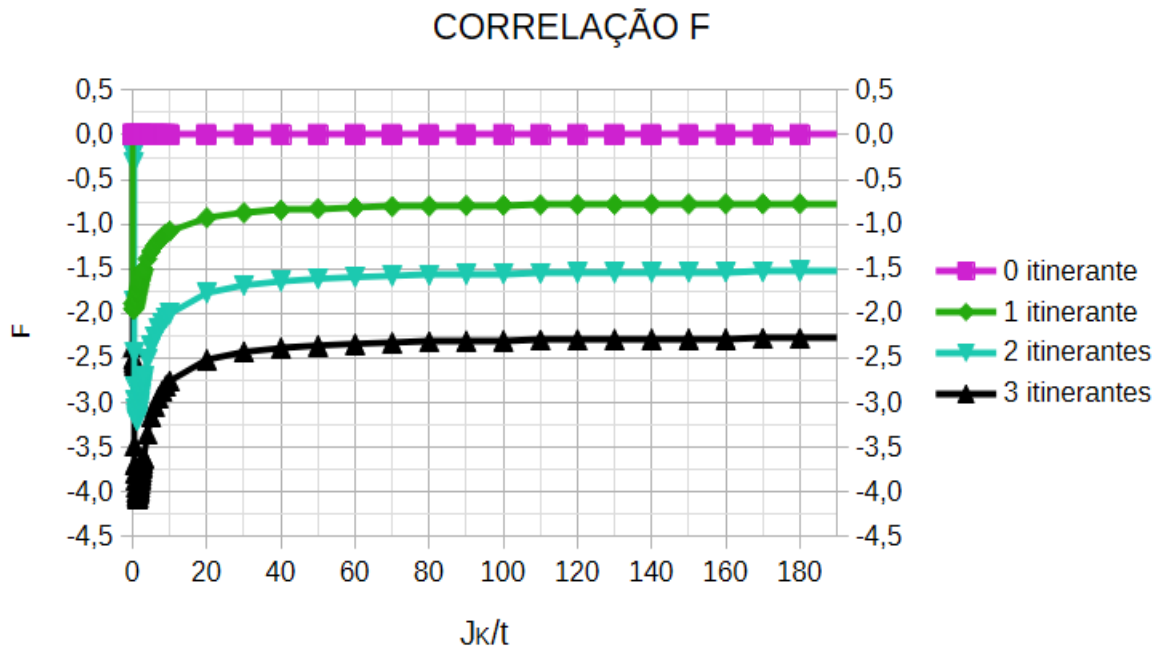


Figura 11 – Variação da correlação F com os valores $J_z=0,25$ e $J_{xy}=0,2$ Heisenberg-Kondo na direção horizontal (autor)

Para valores altos de $\frac{J_K}{t}$, figura 11, temos, pela seção 4.5, os valores de F para zero itinerantes 0, um itinerante -0,75, dois itinerantes -1,5 e para três itinerantes -2,25.

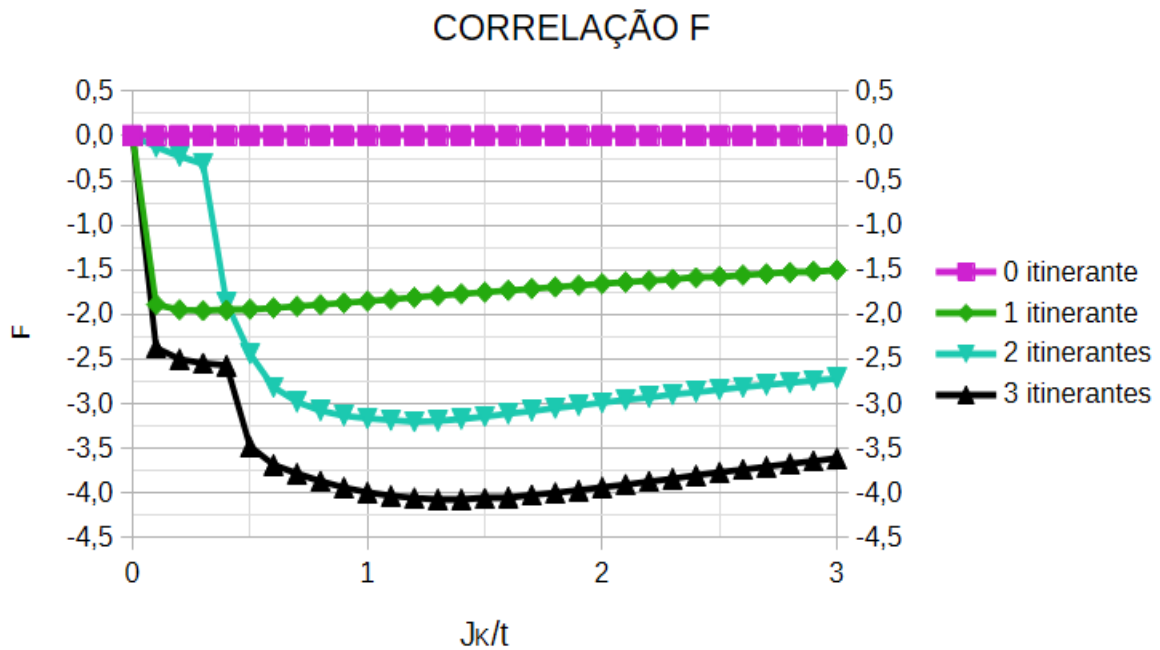


Figura 12 – $J_z=0,25$ e $J_{xy}=0,2$ direção horizontal. Zoom da figura 11, nos valores iniciais de $\frac{J_K}{t}$ (autor)

Inicialmente, para $\frac{J_K}{t}$ próximo de zero, figura 12, não existem interações entre spins localizados e itinerantes. Com 1, 2 e 3 elétrons itinerantes, para $\frac{J_K}{t}$ próximo de zero, temos uma forte queda devido à competição com as interações RKKY e Kondo, pois aqui os elétrons “visitam” virtualmente vários sítios antes de se fixar em singletos, gerando uma correlação momentaneamente mais negativa do que no regime de forte acoplamento, de onde temos uma sobressaturação. Após esse instante o sistema se estabiliza, o que significa que os elétrons itinerantes se equilibram em um estado de estabilidade.

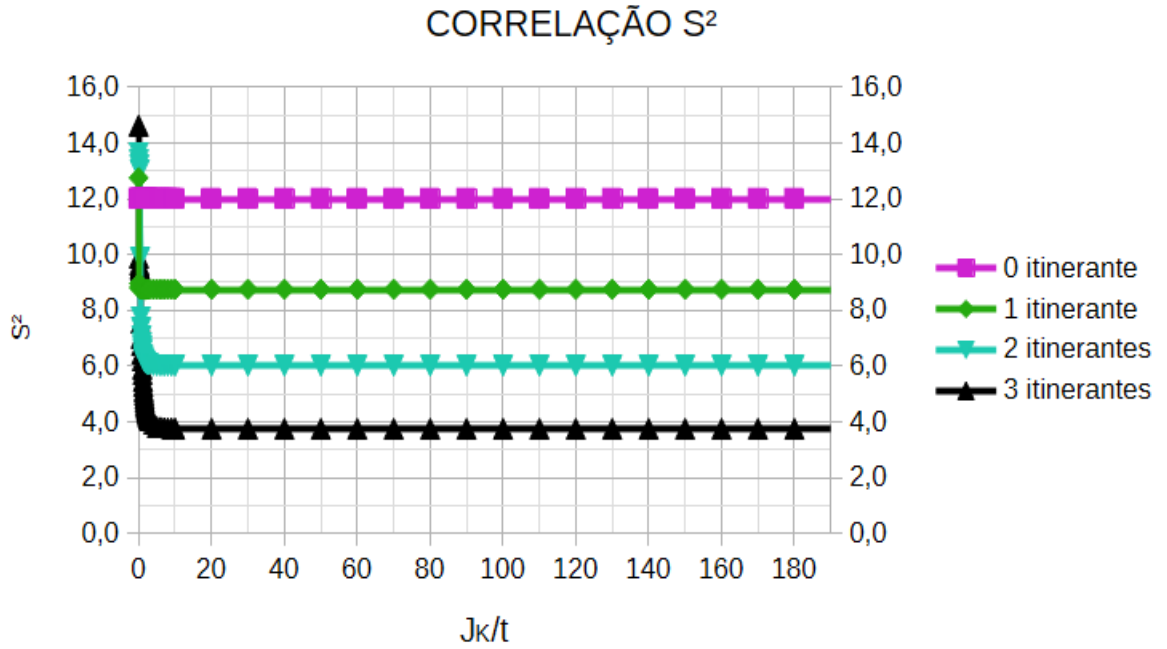


Figura 13 – Variação da correlação S^2 em função dos valores $J_z = 0,25$ e $J_{xy}=0,2$, ou seja Heisenberg-Kondo na direção horizontal e do valor de $\frac{J_K}{t}$ (autor)

Para $\frac{J_K}{t}$ elevado, figura 13, S^2 é dado pelos valores da tabela 3. Ou seja 0 itinerante $S^2 = 12$, 1 itinerante $S^2 = 8,75$, 2 itinerantes $S^2 = 6$ e 3 itinerantes $S^2 = 3,75$.

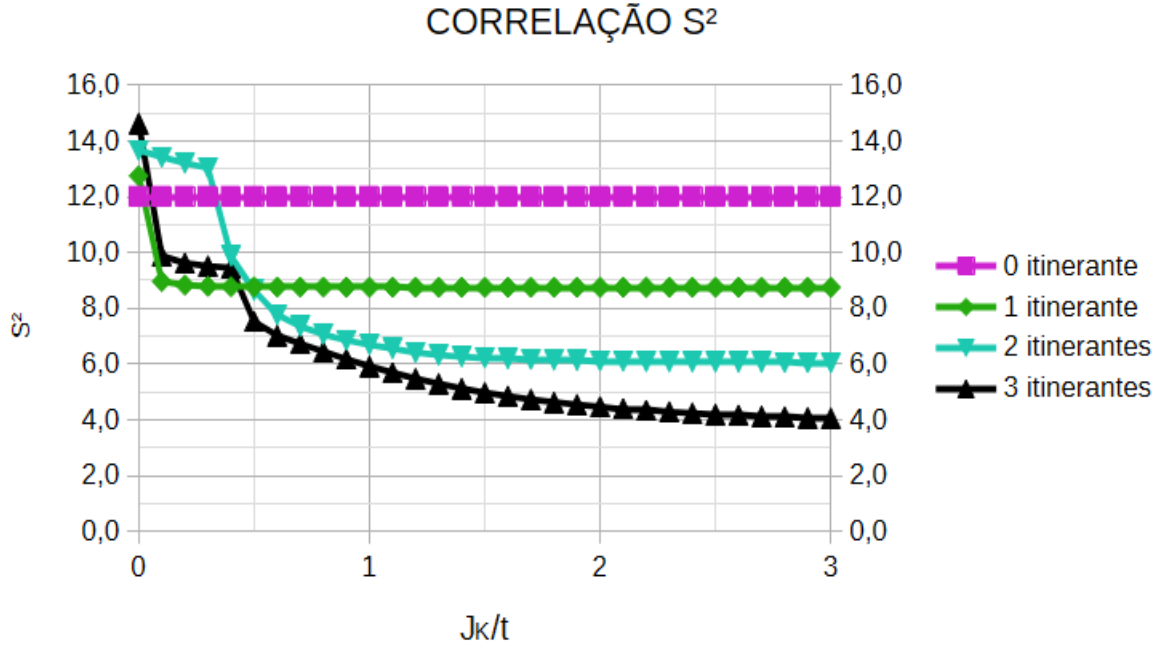


Figura 14 – $J_z = 0,25$ e $J_{xy} = 0,2$ Heisenberg-Kondo na direção horizontal. Zoom da figura 13 para valores iniciais de $\frac{J_K}{t}$ (autor)

Para correlação S^2 , com J_K próximo do zero, figura 14, temos o valor de $F = 0$, logo pela fórmula 28 deduzimos os valores de 12 para zero itinerante, 12,75 para um itinerante, 13,5 para dois itinerantes e 14,25 para três itinerantes.

Observando o comportamento das curvas podemos deduzir que tanto o modelo de Ising-Kondo como o modelo de Heisenberg-Kondo, no caso ferromagnético, se comportam de forma idêntica nos valores extremos, ou seja $\frac{J_K}{t}$ tendendo à zero e tendendo ao infinito.

5.4 Tipo Heisenberg-Kondo antiferromagnético

Uma interação Heisenberg-Kondo é antiferromagnética quando $J_z + J_{xy} < 0$, ou seja $J_M < 0$. Nesta seção apenas apresentamos um modelo com forte isotropia. Os valores das correlações abaixo, para altos valores de $\frac{J_K}{t}$ são calculados nas seções 4.4, 4.5 e 4.6. Portanto apresentam apenas os valores correspondentes.

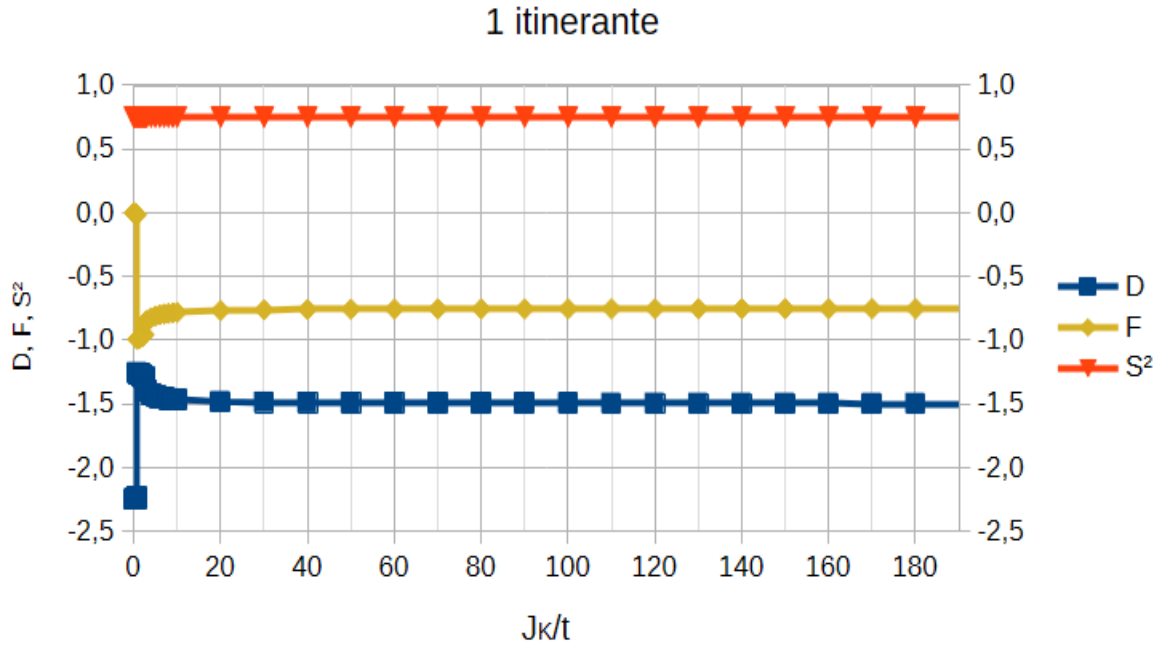


Figura 15 – $J_z = -0,2 = J_{xy}$ Heisenberg-Kondo isotrópico, com um elétron itinerante. Correlações D , F e S^2 variando em função do efeito Kondo dividido pela energia cinética do movimento dos elétrons de condução. (autor)

Na figura 15 observa-se quando o acoplamento acontece, ou seja, elétron itinerante blinda o elétron localizado. No caso de apenas um itinerante, com interação antiferromagnética, temos os valores $D = -1,5$, $F = -0,75$ e $S^2 = 0,75$.

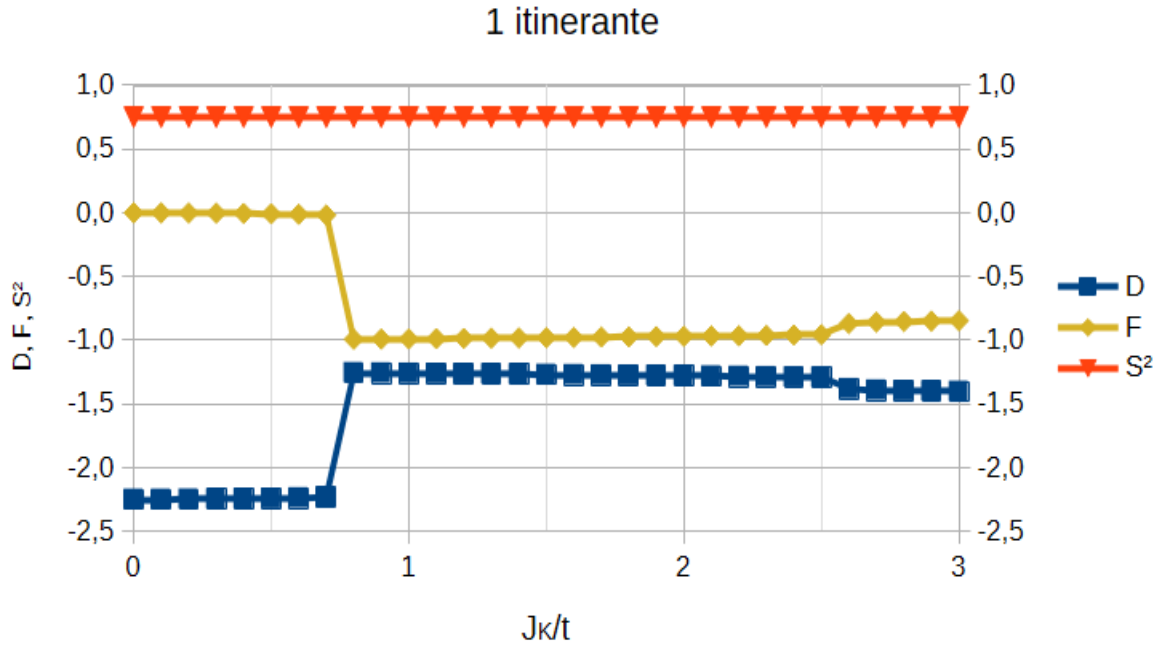


Figura 16 – $J_z = -0,2 = J_{xy}$ Heisenberg-Kondo isotrópico. Zoom da figura 15 para os valores iniciais de $\frac{J_K}{t}$ (autor)

As curvas de D e F são espelhados em torno de um valor de intensidade de $-1,25$, enquanto S^2 é constante, como na figura 16. Com valores de $\frac{J_K}{t}$ baixos D e F estão em estado de isolante de Mott, sem interferência dos elétrons itinerantes, logo com o valor de $D = -2,25$ e $F = 0$.

À medida que aumenta o valor de $\frac{J_K}{t}$, D e F se aproximam e temos uma concorrência entre os efeitos Kondo e RKKY, até por fim termos uma sobressaturação e o sistema se estabilizar.

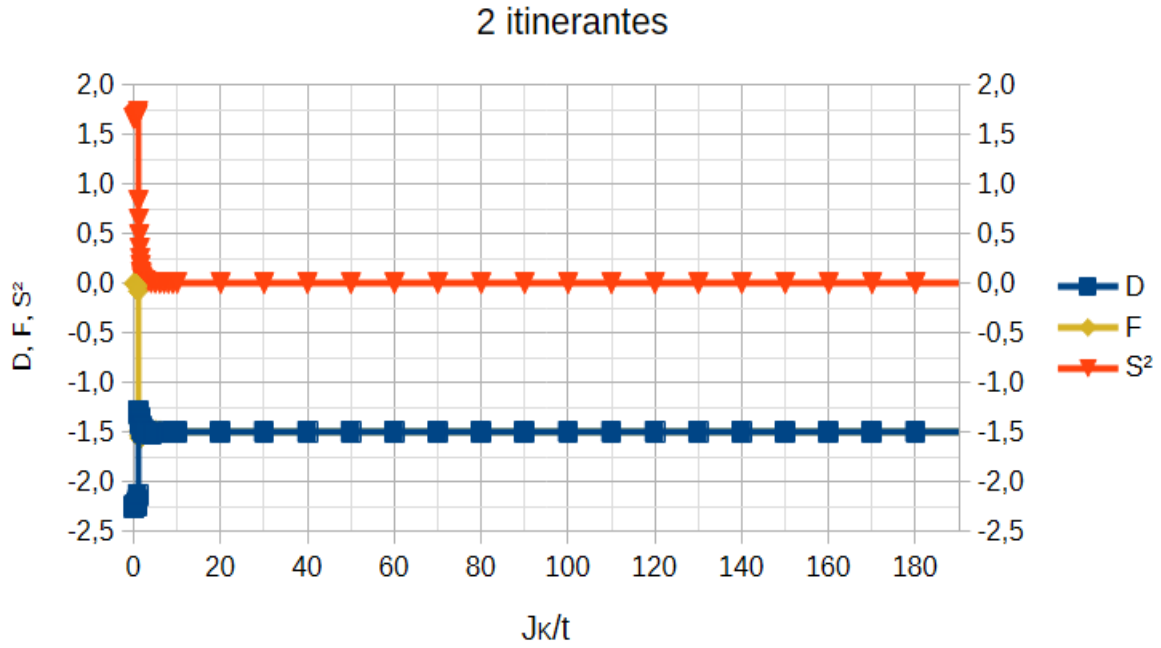


Figura 17 – $J_z = -0,2 = J_{xy}$ Heisenberg-Kondo isotrópico, com dois elétrons itinerantes. Correlações D , F e S^2 variando em função do efeito Kondo dividido pela energia cinética do movimento dos elétrons de condução (autor)

Na figura 17 temos análise semelhante ao caso da figura 15, para dois itinerantes com interações em estado antiferromagnético. Obtém-se os valores $D = -1,5$, $F = -1,5$ e $S^2 = 0$.

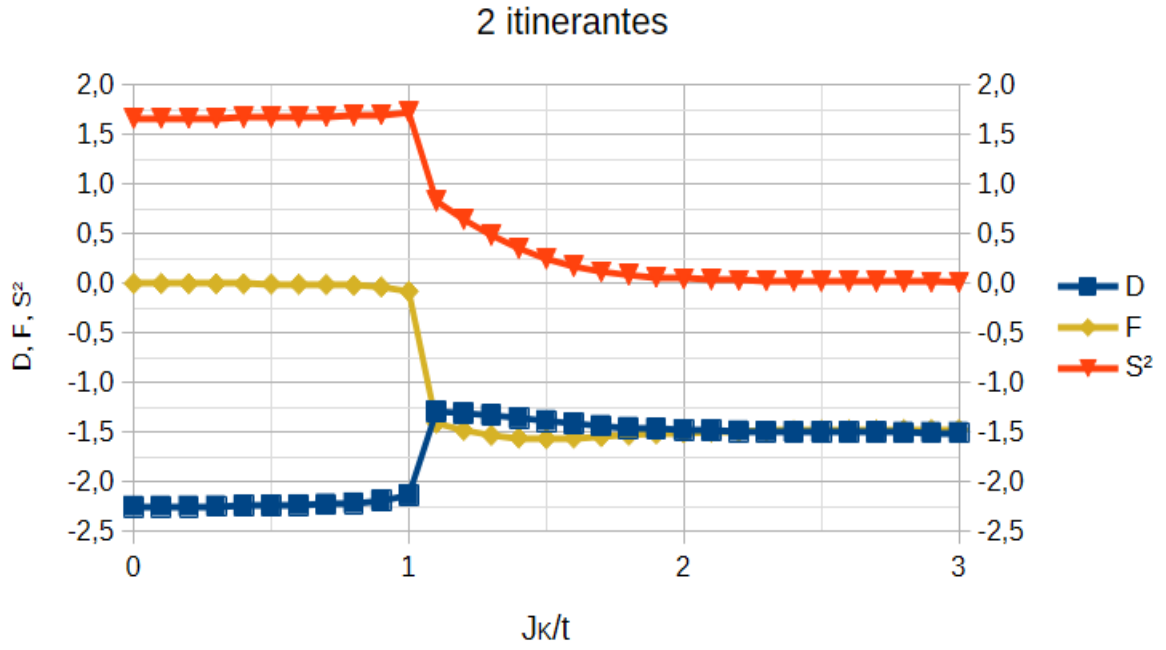


Figura 18 – $J_z = -0,2 = J_{xy}$ Heisenberg-Kondo isotrópico. Zoom da figura 17 para os valores iniciais de $\frac{J_K}{t}$ (autor)

Para valores de $\frac{J_K}{t}$ até 0,5 as curvas se comportam como se não houvesse itinerante, como visto na figura 18.

À medida que aumenta o valor de $\frac{J_K}{t}$, D e F se aproximam, por influência da concorrência entre o efeito Kondo e o RKKY. Próximo a $\frac{J_K}{t} = 2$, existe uma sobressaturação e o sistema se estabiliza, devido ao acoplamento dos elétrons itinerantes.

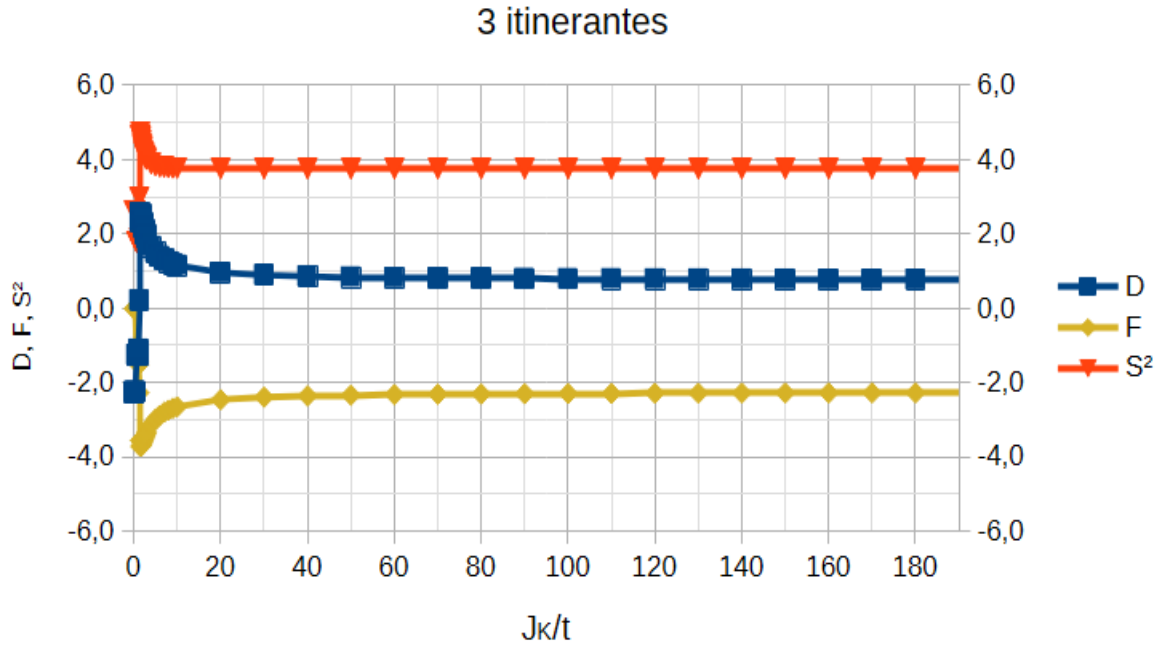


Figura 19 – $J_z = -0,2 = J_{xy}$ Heisenberg-Kondo isotrópico, com três elétrons itinerantes. Correlações D , F e S^2 variando em função do efeito Kondo dividido pela energia cinética do movimento dos elétrons de condução (autor)

Na figura 19 temos o acomplamento para três itinerantes com interações em estado antiferromagnético. Obtém-se os valores $D = 0,75$, $F = -2,25$ e $S^2 = 3,75$.

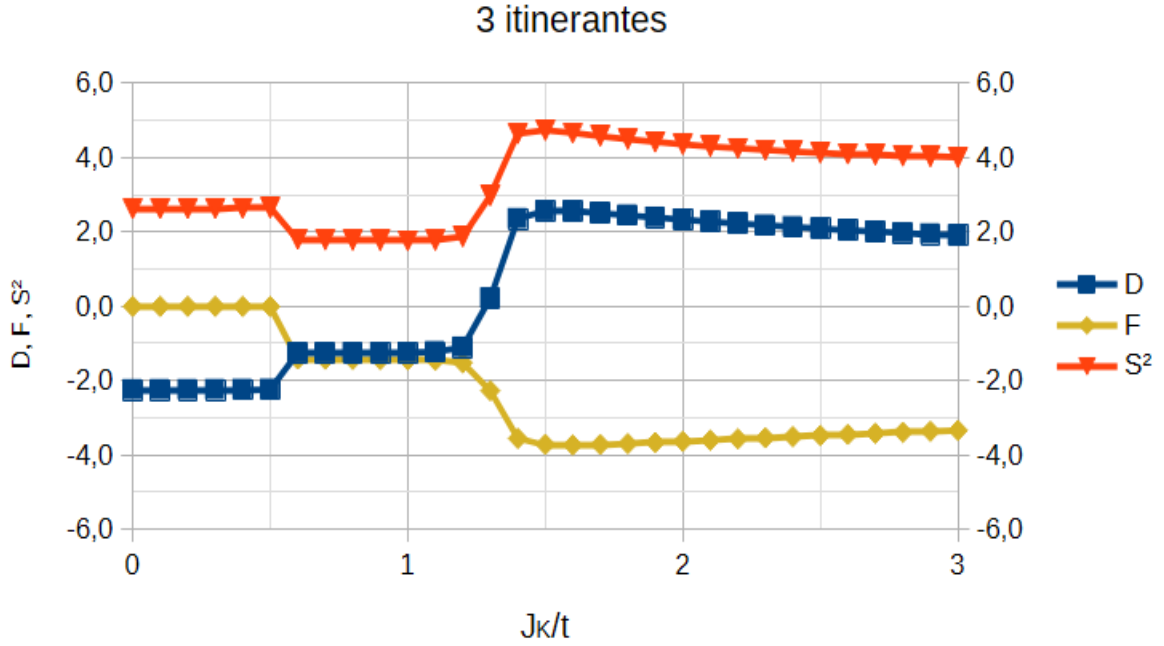


Figura 20 – $J_z = -0,2 = J_{xy}$ Heisenberg-Kondo isotrópico. Zoom da figura 19 para os valores iniciais de $\frac{J_K}{t}$ (autor)

Para valores de $\frac{J_K}{t}$ até 0,5 as curvas se comportam como se não houvesse itinerante, como visto na figura 20.

Para $\frac{J_K}{t}$ há um pequeno predomínio da correlação D , negativa. Já spins locais e itinerante flutuam sem correlacionar.

À medida que aumenta o valor de $\frac{J_K}{t}$, D e F se aproximam até se oscurem. Próximo a 1,25 existe uma sobressaturação e a interação RKKY se torna elevada até atingir um pico próximo do valor 1,5. Então o sistema se estabiliza, devido ao acoplamento dos elétrons itinerantes.

As curvas se comportam de forma parecida, mas com intensidades distintas para um, dois ou três itinerantes. podemos ver que a interação antiferromagnética se comporta com os valores esperados deduzidos dos cálculos de D , F e S^2 visto nos capítulos anteriores.

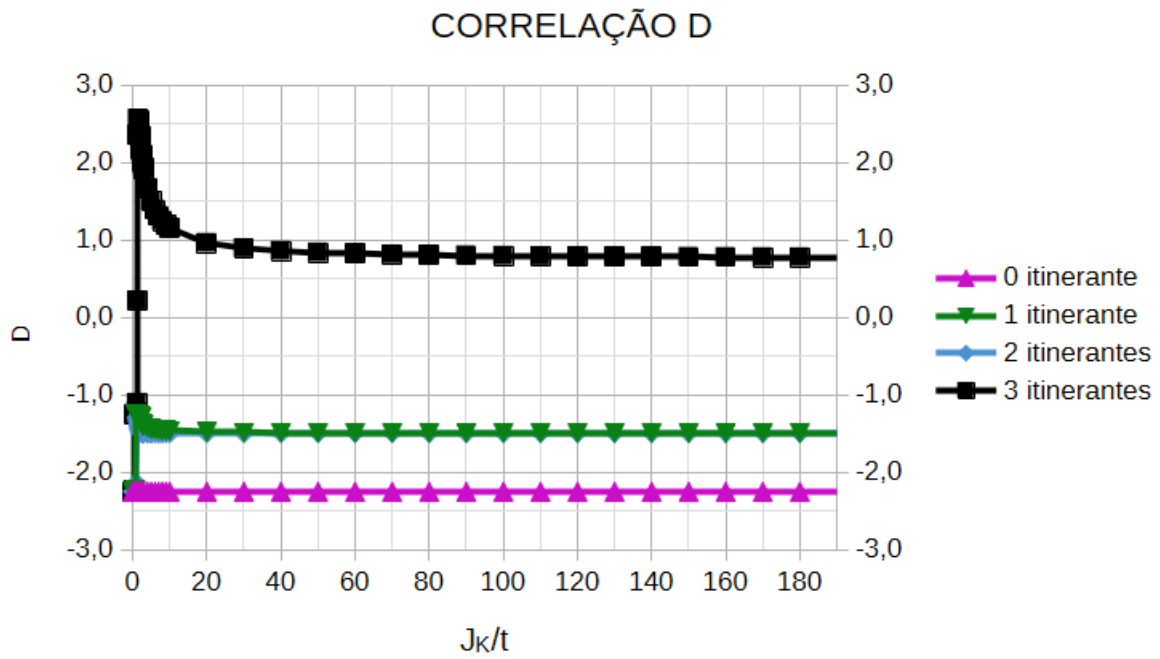


Figura 21 – Correlação D , para um, dois e três itinerantes com valores $J_z = -0,2 = J_{xy}$, ou seja Heisenberg-Kondo isotrópico (autor)

Quando o acoplamento acontece, figura 21, em estado antiferromagnético, temos para $\frac{J_K}{t}$ elevado, os valores de D são de acordo com a fórmula (15) e pela tabela 2.

Assim, seguindo o cálculo teremos para zero itinerante $D = -2,25$, para um itinerante $D = -1,5$, para dois itinerantes $D = -1,5$ e para três itinerantes $D = 0,75$.

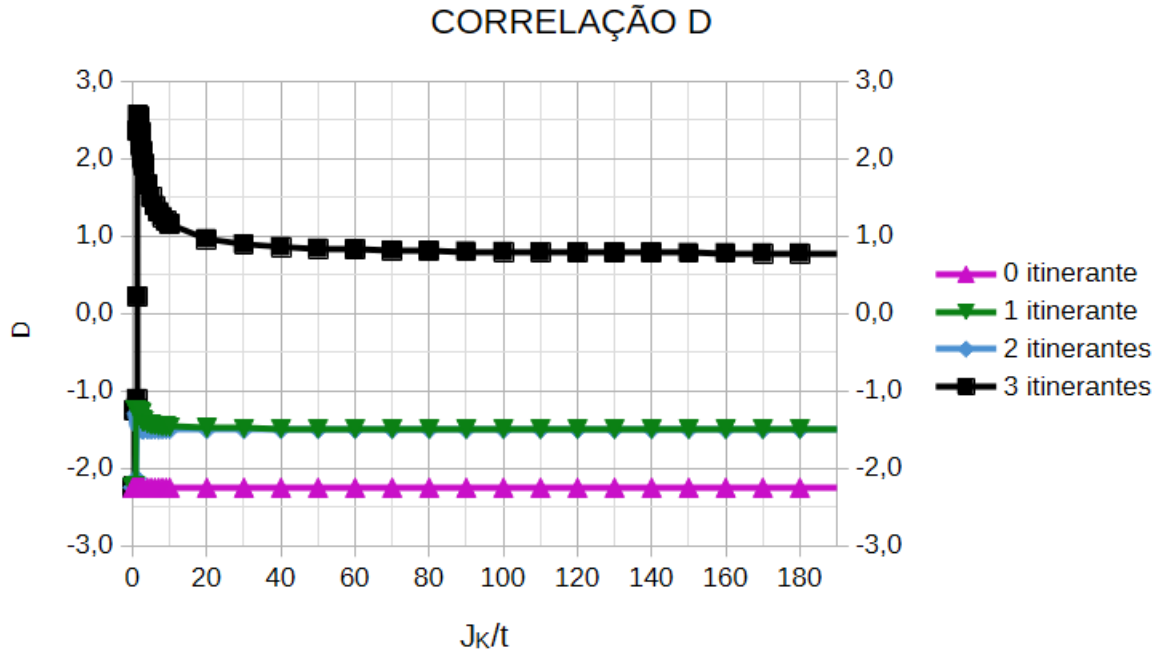


Figura 22 – Correlação D , para um, dois e três itinerantes com valores $J_z = -0,2 = J_{xy}$, ou seja Heisenberg-Kondo isotrópico. Zoom da figura 21 nos valores iniciais de $\frac{J_K}{t}$ (autor)

Pela figura 22, temos que para valores pequenos de $\frac{J_K}{t}$ os elétrons itinerantes flutuam sem qualquer correlação, em isolante de Mott.

Após $\frac{J_K}{t} = 0,5$ a energia de ligação antiferromagnética do efeito Kondo começa a quebrar ativamente o alinhamento antiferromagnético entre spins locais. As “visitas virtuais” do itinerante ampliam momentaneamente a fragilidade do ordenamento antes da consolidação do singleto (interação RKKY). Por fim cada itinerante emparelha-se firmemente a um spin local, removendo-o das flutuações.

Para 3 itinerantes as oscilações são de magnitudes muito maiores e a sobressaturação forma um platô, por volta de $\frac{J_K}{t} = 1,5$ ela se dissipa com o acoplamento Kondo.

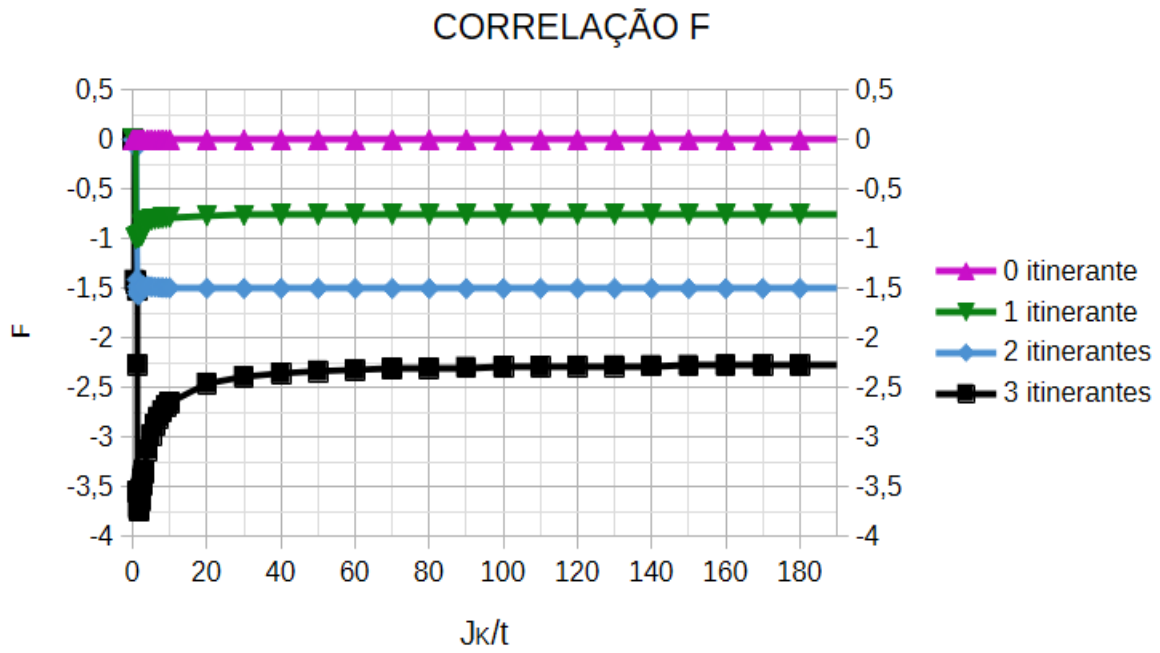


Figura 23 – Correlação F , para um, dois e três itinerantes com valores $J_z = -0,2 = J_{xy}$, ou seja Heisenberg-Kondo isotrópico (autor)

Quando o equilíbrio acontece, figura 23, em estado antiferromagnético, temos para $\frac{J_K}{t}$ elevado, os valores de F são de acordo com a fórmula dos cálculos da seção 4.5. Logo para zero itinerante $F = 0$, um itinerante $F = -0,75$, para dois itinerantes $F = -1,5$ e para três itinerantes $F = -2,25$

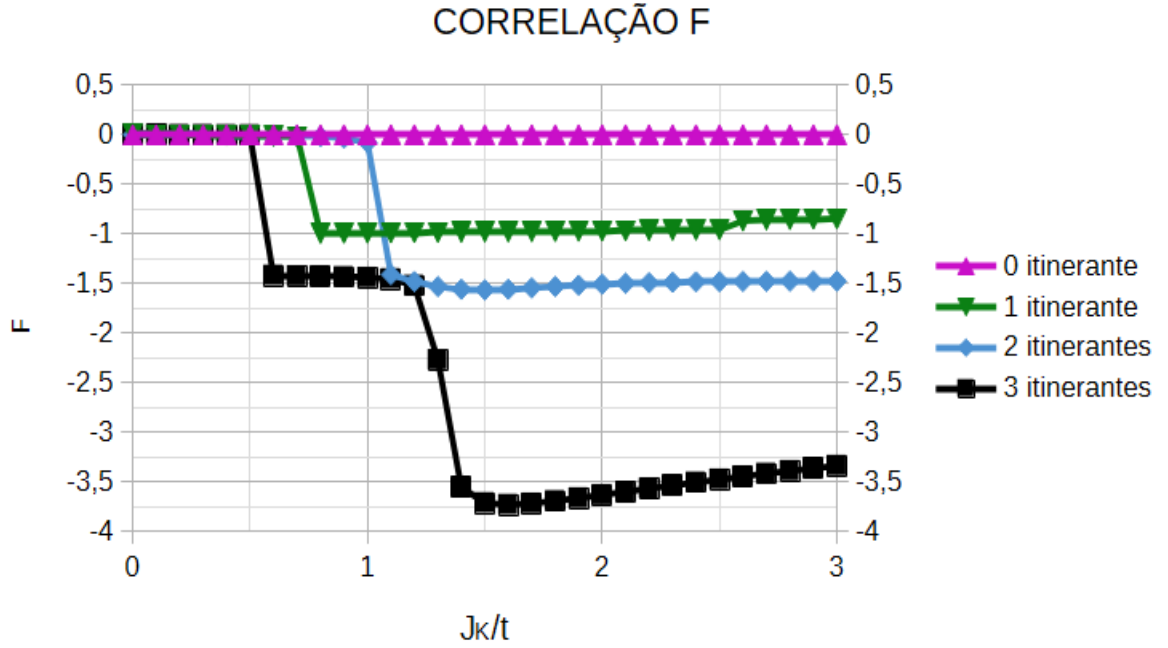


Figura 24 – Correlação F , para um, dois e três itinerantes com valores $J_z = -0,2 = J_{xy}$, ou seja Heisenberg-Kondo isotrópico. Zoom da figura 23 nos valores iniciais de $\frac{J_K}{t}$ (autor)

Para 0 itinerante $F=0$. Para 1, 2 e 3 itinerantes a interação começa a ser observada a partir de $\frac{J_K}{t}$ próximo de 0,5. O itinerante “visita” vários spins locais antes de se fixar, gerando uma correlação momentaneamente mais fraca do que no regime de singlete já consolidado. Com 3 itinerantes temos a interação RKKY forçando uma nova queda drástica.

Posteriormente o sistema mantém flutuações quânticas e uma pequena sobressaturação, mas vai lentamente se estabilizando à medida que os itinerantes vão se acoplando, como visto na figura 24.

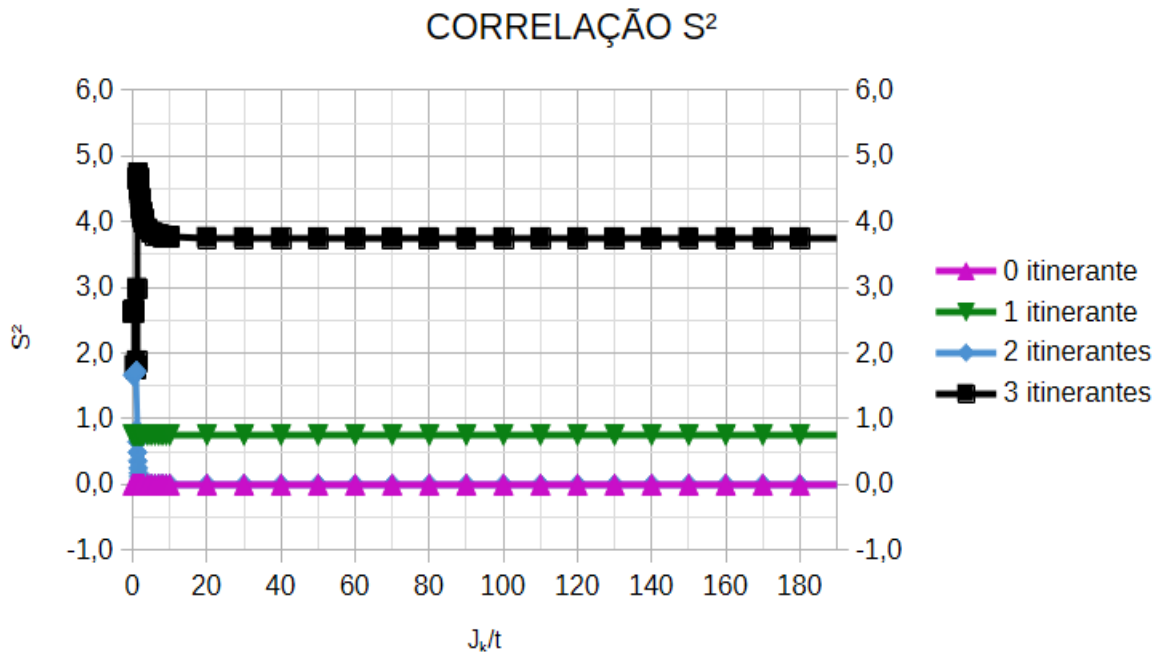


Figura 25 – Correlação S^2 , para um, dois e três itinerantes com valores $J_z = -0,2 = J_{xy}$, ou seja Heisenberg-Kondo isotrópico com interação de troca antiferromagnético (autor)

Quando o acoplamento acontece, figura 25, em interação de troca antiferromagnética, temos para $\frac{J_K}{t}$ elevado, os valores de S^2 são de acordo com os resultados da tabela 4. Logo para zero itinerante $S^2 = 0$, um itinerante $S^2 = 0,75$, para dois itinerantes $S^2 = 0$ e para três itinerantes $S^2 = 3,75$

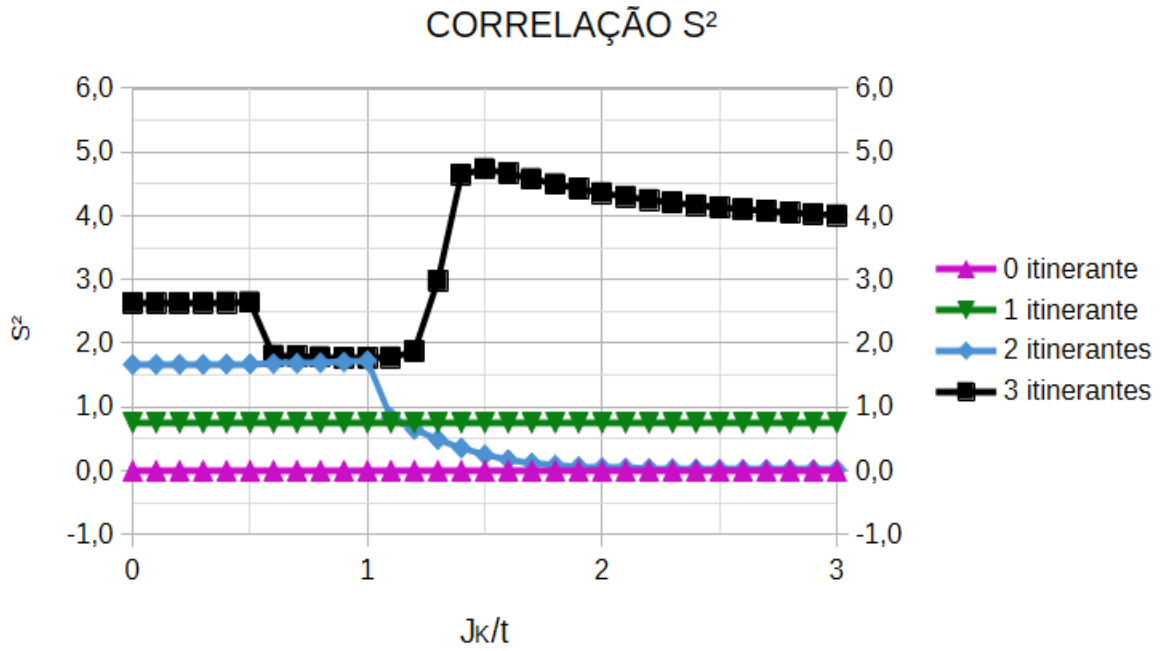


Figura 26 – Correlação S^2 , para um, dois e três itinerantes com valores $J_z = -0,2 = J_{xy}$, ou seja Heisenberg-Kondo isotrópico. Zoom da figura 25 nos valores iniciais de $\frac{J_K}{t}$ (autor)

A figura 26 enfatiza a dependência de S^2 com os valores iniciais de D , F e n_e . Este comportamento não é fácil de ser compreendido.

As curvas no modelo Heisenberg-Kondo antiferromagnético se comportam inicialmente, para valores $\frac{J_K}{t}$ próximos de zero, como se não existisse elétron itinerante no sistema, mas logo uma série de efeitos forçam suas oscilações. Ao atingir um ponto extremo, para altos valores de $\frac{J_K}{t}$, as curvas tendem a valor numérico, previsto na parte analítica da dissertação apresentada nas seções 4.4, 4.5 e 4.6.

5.5 Temperatura

Nesta seção apresentamos os resultados de variação das correlações D , F e S^2 variando a temperatura e mantendo $\frac{J_K}{t}$ constante para um elétron itinerante e interação Heisenberg-Kondo e sem a utilização do método de Lanczos. Temos duas variações uma com forte interação Kondo e outra com fraca interação Kondo.

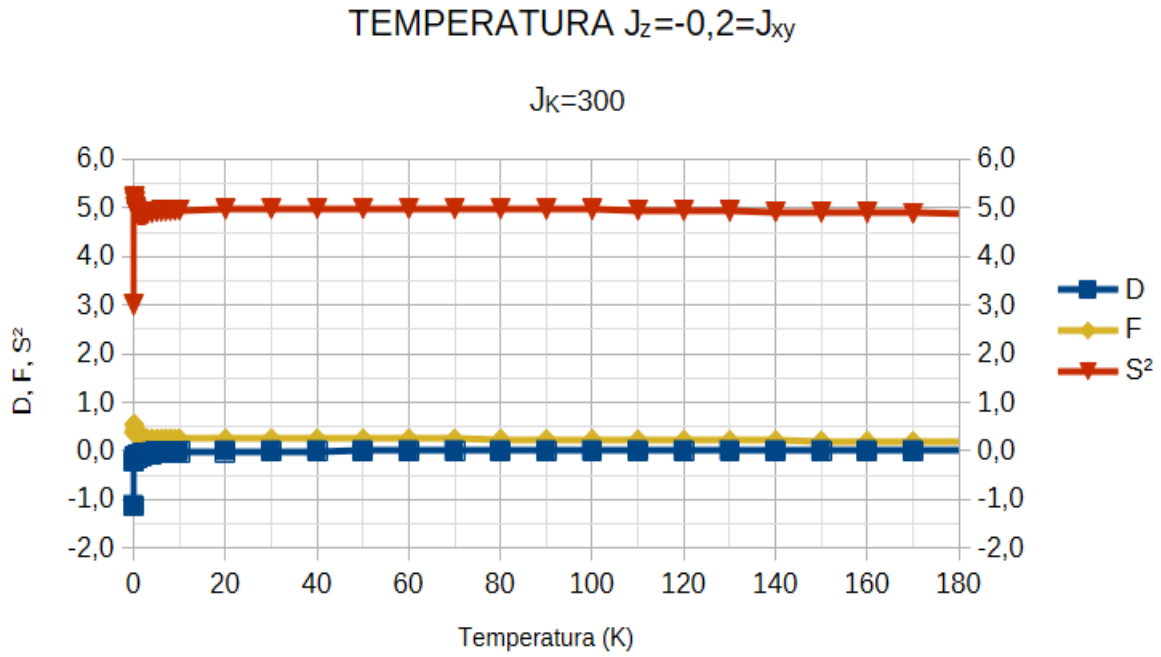


Figura 27 – Comportamento das correlações D , F e S^2 , com interação de troca antiferromagnético Heisenberg-Kondo isotrópico, em função da temperatura com efeito Kondo constante igual a 300 em um sistema com 1 elétron itinerante (autor)

Quando a temperatura tende ao infinito, figura 27, D tende a zero, como visto nos cálculos de D no anexo A.

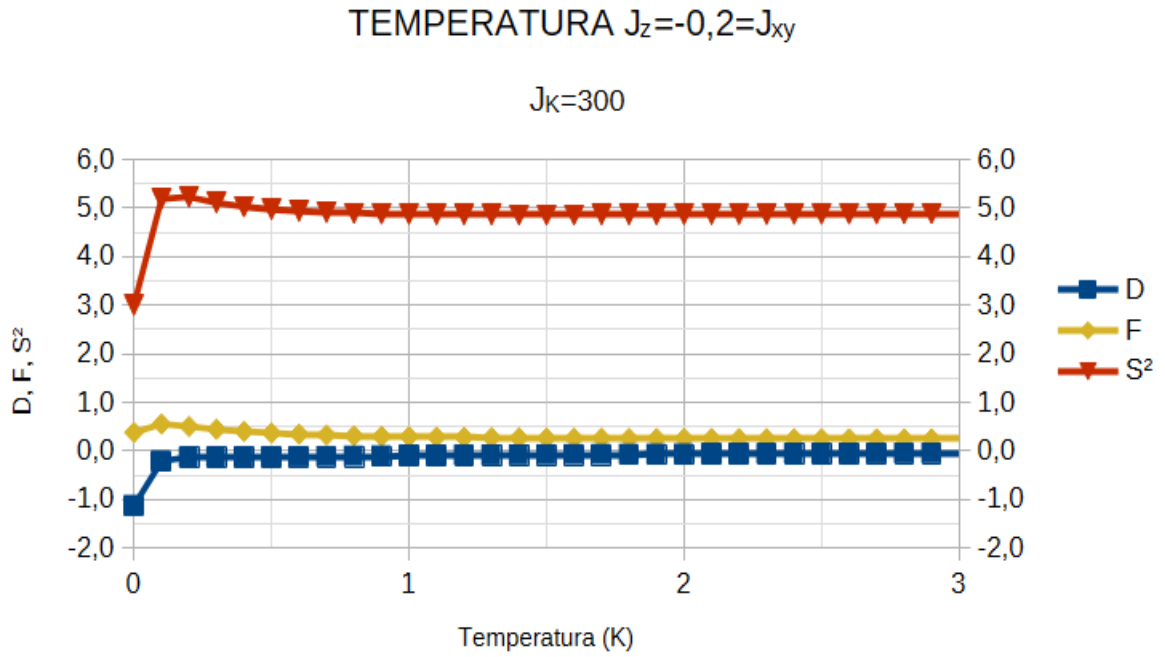


Figura 28 – com 1 itinerante zoom (autor)

Para D , com temperatura próximo de zero, figura 28, pelo gráfico apresentado na figura 31 temos o valor de D como -1 devido a uma forte correlação antiferromagnética ao longo do eixo z , formando singletos dominados pelo acoplamento Kondo. Posteriormente as flutuações térmicas começam a quebrar os singletos. Por fim o valor médio de D tende a zero, característica de um estado paramagnético.

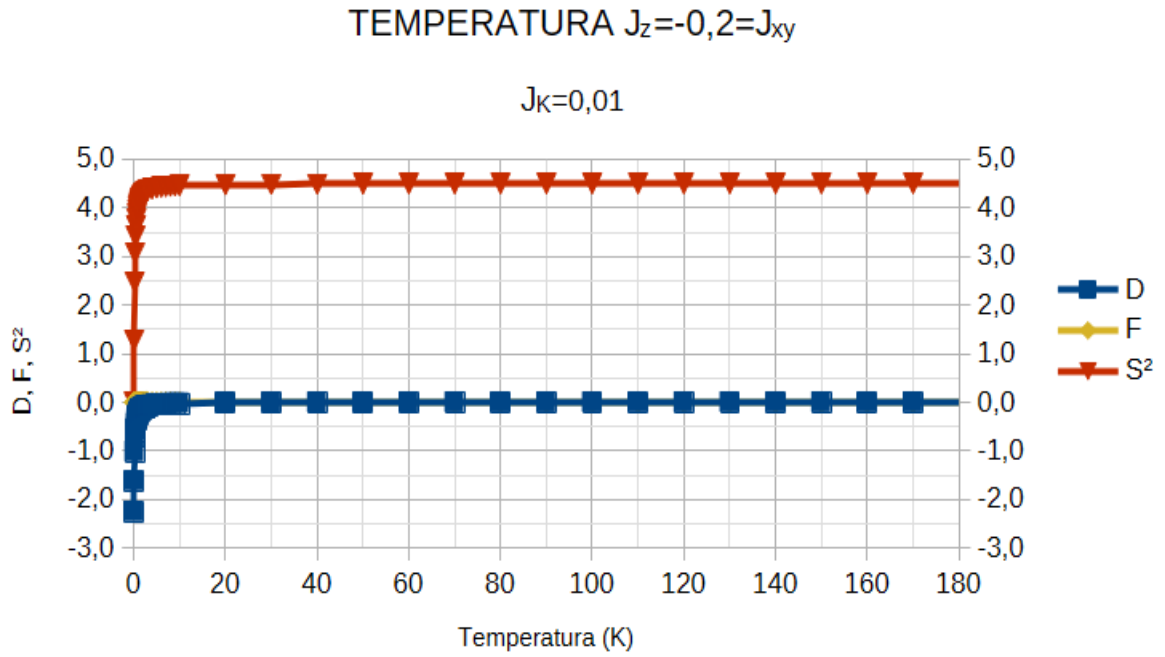


Figura 29 – Variação das correlações, em estado antiferromagnético Heisenberg-Kondo isotrópico, em função da temperatura com efeito Kondo constante igual a 0,01, próximo de zero, em um sistema com 1 elétron itinerante (autor)

Quando a temperatura tende ao infinito, figura 29, D tende a zero, como visto nos cálculos de D no anexo A.

O valor de F é zero devido a baixa interação Kondo e o valor de S^2 é dado por (28).

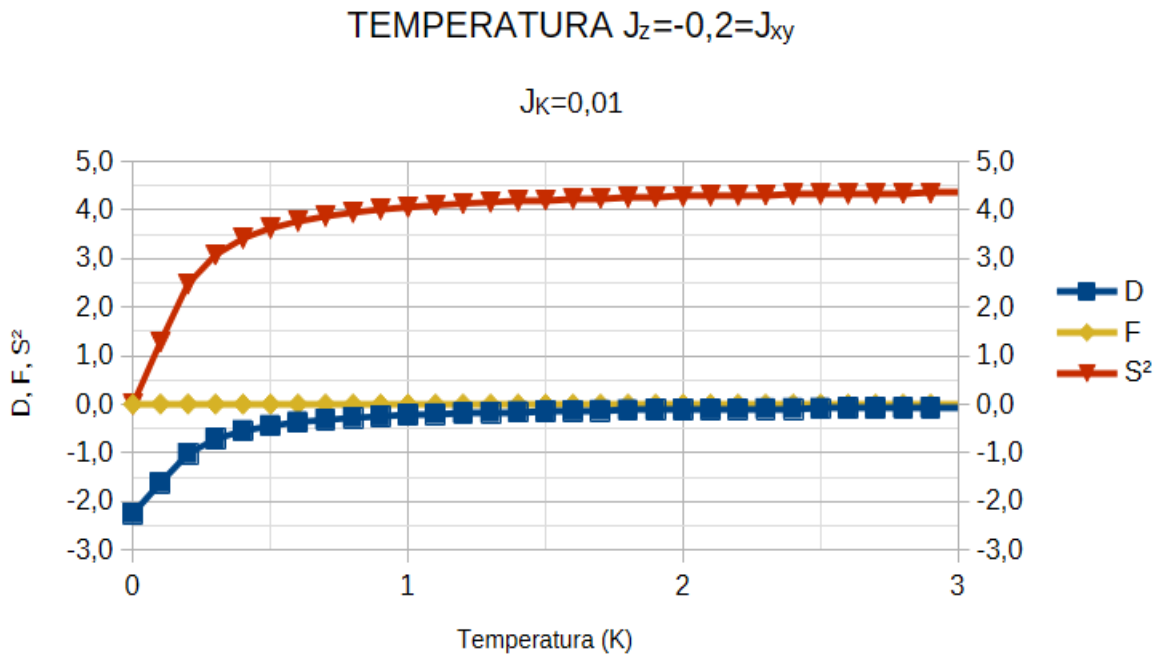


Figura 30 – Zoom da figura 29 com os valores pequenos de temperatura (autor)

A figura 30 apresenta ampliada a região de baixa temperatura da figura 29. Podemos observar o comportamento das correlações com baixa influência do efeito Kondo. O valor de D apresenta interação antiferromagnética, sinalizando que vizinhos tendem a alinhar-se antiparalelamente, tendo como valor inicial $D = -2,25$. A interação com elétrons itinerantes é desprezível, $F = 0$.

Aumentando a temperatura as flutuações térmicas vão “quebrando” os pares antiferromagnéticos, reduzindo o módulo da correlação D até zera-lo.

6 Conclusão

Nesta dissertação investigamos o comportamento dos spins de elétrons em uma configuração espacial de um hexágono, que denominamos de *cluster* hexagonal. Em cada vértice existe um elétron fixo (spin localizado). Elétrons móveis (spins itinerantes), variando de zero a três, podem saltar entre vértices vizinhos. Considera-se que as interações entre os elétrons são apenas de caráter magnético, dependendo apenas do alinhamento entre seus spins. Entre spins localizados vizinhos permite-se que a interação seja ferro ou antiferromagnética. Entre um spin localizado e um spin itinerante na mesma posição considera-se que a interação seja antiferromagnética. Neste sistema simples já foi possível observar fenômenos como frustração magnética e Efeito Kondo.

Este *cluster* foi modelado por dois tipos de hamiltonianos: (i) tipo Ising–Kondo e (ii) tipo Heisenberg–Kondo. O primeiro considera que o alinhamento entre os spins só pode ocorrer em uma única direção (paralela ou antiparalela), enquanto o segundo permite o alinhamento também em outras direções. Foi considerado que este sistema físico está em contato com um banho térmico com uma temperatura conhecida. Nestes hamiltonianos existem parâmetros cujos valores determinam as intensidades das interações entre spins, e se elas são do tipo ferro ou antiferromagnéticas. Por isso o sistema permite várias configurações físicas possíveis.

Os hamiltonianos foram solucionados numericamente usando um código computacional. Como a base de vetores dos estados quânticos do sistema é muito grande, a diagonalização usou o método de Lanczos na maior parte das vezes. Foram determinadas correlações (médias estatísticas no ensemble canônico) entre os spins localizados e itinerantes do *cluster*. A correlação total entre os spins localizados (D), a correlação total entre spins localizados e itinerantes (F) e o valor esperado do spin quadrado total (S^2) foram determinadas para várias configurações diferentes. Nas situações possíveis, cálculos analíticos foram realizados para validação dos resultados numéricos.

Os resultados numéricos foram apresentados em forma de gráficos, em que o eixo horizontal representa a intensidade da interação antiferromagnética entre spin localizado e spin itinerante ($J_K > 0$). Verificou-se que os comportamentos de D , F e S^2 tendem para valores exatos quando $J_K \rightarrow \infty$, e estes valores dependem do número de spins itinerantes. É importante observar que estes valores nos gráficos também foram obtidos por cálculos analíticos que consideram a ocorrência de Efeito Kondo e de frustração magnética, equação 29. Os casos mais simples são aqueles em que a interação entre spins localizados é ferromagnética, como pode ser observado no comportamento de S^2 na figura 13 e na tabela 3. Já os casos mais complexos são aqueles em que a interação entre spins localizados

é antiferromagnética, como pode ser observado na figura 25 e na tabela 4. Nestes últimos casos aparece o fenômeno da frustração magnética com dependência do número de spins itinerantes ser par (0 ou 2) ou ímpar (1 ou 3) nestas situações. Em todas as configurações, ferro ou antiferromagnético, os cálculos analíticos não são capazes de descrever as curvas dos gráficos para valores pequenos de J_K ($J_K \sim 0$). Nesta região fica evidente a presença de outras forças e efeitos que competem com o Efeito Kondo e a frustração magnética, sendo que este último depende do número par ou ímpar de spins itinerantes.

Por fim analisou-se o comportamento das correlações D , F e S^2 com a variação da temperatura para casos de interação antiferromagnética entre spins localizados. Estes resultados também foram apresentados em forma de gráficos para diferentes configurações. O comportamento das curvas modifica-se de acordo com a intensidade de J_K . Em baixas temperaturas os acoplamentos entre os spins ainda prevalecem e as correlações dependem da intensidade das interações. À medida que a temperatura aumenta, as flutuações térmicas tendem a anular progressivamente as correlações D e F .

Do ponto de vista físico, esta pesquisa contribuiu para uma melhor compreensão dos fenômenos quânticos e magnéticos de um sistema finito de spins fixos e itinerantes. A correlação D positiva indica que os spins localizados estão, em média, alinhados paralelamente (comportamento ferromagnético). É interessante observar que isto pode acontecer mesmo em configurações em que se atribuiu interação antiferromagnética entre os spins localizados. Isto acontece nos regimes em que a interação antiferromagnética entre spin localizado e spin itinerante, J_K , prevalece sobre a interação antiferromagnética entre spins localizados vizinhos: estes spins vizinhos, forçados a serem antiparalelos com o spin itinerante, acabam sendo paralelos entre si (ver figura 22, caso 03 itinerantes). Apesar de termos usado um *cluster* hexagonal, é razoável esperar que tal comportamento também aconteça com *clusters* em outros formatos espaciais. Esta pesquisa permite extrapolações para outros sistemas com geometrias e interações semelhantes.

Compreender os movimentos abruptos que aparecem nos limites iniciais do efeito Kondo ainda carece de uma pesquisa aprofundada e uma análise mais intensa sobre os conceitos físicos como isolante de Mott, sobressaturação magnética e interação RKKY, que embasam as possíveis interações que competem com o efeito Kondo no sistema. Isto caracteriza um possível tema para pesquisas futuras.

Anexos

Este anexo descreve os cálculos, para dois e três spins, do momento D , interação dos spins localizados. Em sequência se demonstrará a diagonalização da matriz D em uma base ortonormal e o cálculo do valor esperado de D e a interação de D em função da temperatura e energia.

Ainda temos uma seção sobre as bibliotecas e funções utilizadas no programa, bem como as configurações das máquinas utilizadas.

Por fim temos o algoritmo do método de Lanczos e sua demonstração.

ANEXO A – Cálculo de D

Por motivo de simplicidade usaremos o nome O para reservar aos cálculos dos parâmetros D da dissertação e T , maiúsculo, para se referir a temperatura.

$$[S_z, S_x] = i\hbar S_y \quad (30)$$

$$S^2 |sm\rangle = \hbar^2 s(s+1) |sm\rangle \quad S_z |sm\rangle = \hbar m |sm\rangle \quad (31)$$

$$S^\pm |sm\rangle = \hbar \sqrt{s(s+1) - m(m \pm 1)} |s(m \pm 1)\rangle \quad (32)$$

$$S^\pm = S_x \pm iS_y \quad S_x = \left(\frac{1}{2}\right)(S^+ + S^-) \quad S_y = \left(\frac{1}{2i}\right)(S^+ - S^-) \quad (33)$$

$$s = \frac{1}{2}; \quad m = +\frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \quad S^+(\downarrow) = \hbar(\uparrow); \quad S^-(\uparrow) = \hbar(\downarrow) \quad (34)$$

$$S_x(\downarrow) = \frac{\hbar}{2}(\uparrow); \quad S_x(\uparrow) = \frac{\hbar}{2}(\downarrow); \quad (35)$$

$$S_y(\downarrow) = \frac{\hbar}{2i}(\uparrow); \quad S_y(\uparrow) = -\frac{\hbar}{2i}(\downarrow); \quad (36)$$

$$S_z(\downarrow) = -\frac{\hbar}{2}(\downarrow); \quad S_z(\uparrow) = \frac{\hbar}{2}(\uparrow), \quad (37)$$

considere dois spins $\frac{1}{2}$, $\vec{S}^{(1)}$ e $\vec{S}^{(2)}$ cuja interação é descrita por:

$$\frac{\hat{H}}{-J} = \vec{S}^{(1)} \cdot \vec{S}^{(2)} = S_x^{(1)} S_x^{(2)} + S_y^{(1)} S_y^{(2)} + S_z^{(1)} S_z^{(2)} \quad \vec{S} = \vec{S}^{(1)} + \vec{S}^{(2)} \quad , \quad (38)$$

esta interação para dois spins é antiferromagnética se $J < 0$ teremos:

$$|s = \frac{1}{2}, m = \frac{1}{2}\rangle = |\uparrow\rangle = (\uparrow) \quad |s = \frac{1}{2}, m = -\frac{1}{2}\rangle = |\downarrow\rangle = (\downarrow) \quad (39)$$

$$\vec{S}^{(1)} \cdot \vec{S}^{(2)}(\uparrow\uparrow) = S_x^{(1)} S_x^{(2)}(\uparrow\uparrow) + S_y^{(1)} S_y^{(2)}(\uparrow\uparrow) + S_z^{(1)} S_z^{(2)}(\uparrow\uparrow) \quad (40)$$

$$\vec{S}^{(1)} \cdot \vec{S}^{(2)}(\uparrow\uparrow) = S_x^{(1)}(\uparrow) S_x^{(2)}(\uparrow) + S_y^{(1)}(\uparrow) S_y^{(2)}(\uparrow) + S_z^{(1)}(\uparrow) S_z^{(2)}(\uparrow) \quad (41)$$

$$\vec{S}^{(1)} \cdot \vec{S}^{(2)}(\uparrow\uparrow) = \frac{\hbar}{2}(\downarrow) \frac{\hbar}{2}(\downarrow) + \frac{-\hbar}{2i}(\downarrow) \frac{-\hbar}{2i}(\downarrow) + \frac{\hbar}{2}(\uparrow) \frac{\hbar}{2}(\uparrow) \quad (42)$$

$$\vec{S}^{(1)} \cdot \vec{S}^{(2)}(\uparrow\uparrow) = \frac{\hbar^2}{4}(\uparrow\uparrow) \quad , \quad (43)$$

logo:

$$\langle\uparrow\uparrow | \vec{S}^{(1)} \cdot \vec{S}^{(2)} | \uparrow\uparrow\rangle = \frac{\hbar^2}{4} \quad , \quad (44)$$

analogamente:

$$\langle \downarrow\downarrow | \vec{S}^{(1)} \cdot \vec{S}^{(2)} | \downarrow\downarrow \rangle = \frac{\hbar^2}{4} , \quad (45)$$

segue:

$$\vec{S}^{(1)} \cdot \vec{S}^{(2)}(\uparrow\downarrow) = S_x^{(1)}S_x^{(2)}(\uparrow\downarrow) + S_y^{(1)}S_y^{(2)}(\uparrow\downarrow) + S_z^{(1)}S_z^{(2)}(\uparrow\downarrow) \quad (46)$$

$$\vec{S}^{(1)} \cdot \vec{S}^{(2)}(\uparrow\downarrow) = S_x^{(1)}(\uparrow)S_x^{(2)}(\downarrow) + S_y^{(1)}(\uparrow)S_y^{(2)}(\downarrow) + S_z^{(1)}(\uparrow)S_z^{(2)}(\downarrow) \quad (47)$$

$$\vec{S}^{(1)} \cdot \vec{S}^{(2)}(\uparrow\downarrow) = \frac{\hbar}{2}(\downarrow)\frac{\hbar}{2}(\uparrow) + \frac{-\hbar}{2i}(\downarrow)\frac{\hbar}{2i}(\uparrow) + \frac{\hbar}{2}(\uparrow)\frac{-\hbar}{2}(\downarrow) , \quad (48)$$

portanto:

$$\vec{S}^{(1)} \cdot \vec{S}^{(2)}(\uparrow\downarrow) = \frac{\hbar^2}{4}(2\downarrow\uparrow - \uparrow\downarrow) , \quad (49)$$

ou seja:

$$\langle \uparrow\downarrow | \vec{S}^{(1)} \cdot \vec{S}^{(2)} | \uparrow\downarrow \rangle = \frac{-\hbar^2}{4}; \quad \langle \downarrow\uparrow | \vec{S}^{(1)} \cdot \vec{S}^{(2)} | \uparrow\downarrow \rangle = \frac{2\hbar^2}{4} , \quad (50)$$

analogamente:

$$\vec{S}^{(1)} \cdot \vec{S}^{(2)}(\downarrow\uparrow) = \frac{\hbar^2}{4}(2\uparrow\downarrow - \downarrow\uparrow) , \quad (51)$$

de onde temos:

$$\langle \downarrow\uparrow | \vec{S}^{(1)} \cdot \vec{S}^{(2)} | \downarrow\uparrow \rangle = \frac{-\hbar^2}{4}; \quad \langle \uparrow\downarrow | \vec{S}^{(1)} \cdot \vec{S}^{(2)} | \downarrow\uparrow \rangle = \frac{2\hbar^2}{4} , \quad (52)$$

em resumo:

$$\langle \uparrow\uparrow | \vec{S}^{(1)} \cdot \vec{S}^{(2)} | \uparrow\uparrow \rangle = \frac{\hbar^2}{4}; \quad \langle \downarrow\downarrow | \vec{S}^{(1)} \cdot \vec{S}^{(2)} | \downarrow\downarrow \rangle = \frac{\hbar^2}{4}; \quad (53)$$

$$\langle \uparrow\downarrow | \vec{S}^{(1)} \cdot \vec{S}^{(2)} | \uparrow\downarrow \rangle = \frac{-\hbar^2}{4}; \quad \langle \downarrow\uparrow | \vec{S}^{(1)} \cdot \vec{S}^{(2)} | \uparrow\downarrow \rangle = \frac{2\hbar^2}{4}; \quad (54)$$

$$\langle \downarrow\uparrow | \vec{S}^{(1)} \cdot \vec{S}^{(2)} | \downarrow\uparrow \rangle = \frac{-\hbar^2}{4}; \quad \langle \uparrow\downarrow | \vec{S}^{(1)} \cdot \vec{S}^{(2)} | \downarrow\uparrow \rangle = \frac{2\hbar^2}{4}. \quad (55)$$

as outras combinações resultam em zero. Assim temos a representação matricial:

$$|\uparrow\uparrow\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}; \quad |\uparrow\downarrow\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}; \quad |\downarrow\uparrow\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}; \quad |\downarrow\downarrow\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

$$\vec{S}^{(1)} \cdot \vec{S}^{(2)} = \frac{\hbar^2}{4} \begin{array}{cc} & \begin{matrix} \uparrow\uparrow & \uparrow\downarrow & \downarrow\uparrow & \downarrow\downarrow \end{matrix} \\ \begin{matrix} \uparrow\uparrow \\ \uparrow\downarrow \\ \downarrow\uparrow \\ \downarrow\downarrow \end{matrix} & \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 2 & 0 \\ 0 & 2 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \end{array}$$

diagonalizando a matriz obtemos:

$$\text{Autovalores} = 1, 1, 1, -3$$

$$\text{Autovetores ortogonais} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} 0 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 \end{pmatrix}$$

de onde temos a matriz diagonalizada:

$$\vec{S}^{(1)} \cdot \vec{S}^{(2)} = \frac{\hbar^2}{4} \begin{array}{cc|cccc} & & |A\rangle & |B\rangle & |C\rangle & |D\rangle \\ \begin{array}{c} |A\rangle \\ |B\rangle \\ |C\rangle \\ |D\rangle \end{array} & \begin{array}{c} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{array} & \begin{array}{c} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{array} & \begin{array}{c} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{array} & \begin{array}{c} 0 \\ 0 \\ 0 \\ -3 \end{array} \end{array}$$

associando os autovetores:

$$\begin{aligned} |A\rangle &= \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = |\uparrow\uparrow\rangle; & |B\rangle &= \begin{pmatrix} 0 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle); \\ |C\rangle &= \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} = |\downarrow\downarrow\rangle; & |D\rangle &= \begin{pmatrix} 0 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle). \end{aligned}$$

Resumindo:

$$|A\rangle \equiv |\uparrow\uparrow\rangle; \quad |B\rangle \equiv \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle); \quad |C\rangle \equiv |\downarrow\downarrow\rangle; \quad |D\rangle \equiv \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle). \quad (56)$$

Sabemos que:

$$\vec{S}^2 = (\vec{S}^{(1)} + \vec{S}^{(2)})^2 = \vec{S}^{(1)2} + \vec{S}^{(2)2} + 2\vec{S}^{(1)} \cdot \vec{S}^{(2)} \quad \vec{S}_z = \vec{S}_z^{(1)} + \vec{S}_z^{(2)}, \quad (57)$$

agora vamos deduzir s e m para os autoestados $|A\rangle, |B\rangle, |C\rangle$ e $|D\rangle$ (por simplicidade vamos omitir o carácter vetorial de S):

$$S^2 |A\rangle = S^2 |\uparrow\uparrow\rangle = S^{(1)2} |\uparrow\uparrow\rangle + S^{(2)2} |\uparrow\uparrow\rangle + 2S^{(1)} \cdot S^{(2)} |\uparrow\uparrow\rangle \quad (58)$$

$$\hbar^2 s(s+1) |A\rangle = \hbar^2 \frac{1}{2} \left(\frac{1}{2} + 1\right) |\uparrow\uparrow\rangle + \hbar^2 \frac{1}{2} \left(\frac{1}{2} + 1\right) |\uparrow\uparrow\rangle + 2\frac{\hbar^2}{4} |\uparrow\uparrow\rangle = 2\hbar^2 |\uparrow\uparrow\rangle \quad (59)$$

$$= \hbar^2 1(1+1) |\uparrow\uparrow\rangle \quad (60)$$

$$s=1$$

$$S_z |A\rangle = S_z^{(1)} |\uparrow\uparrow\rangle + S_z^{(2)} |\uparrow\uparrow\rangle = \hbar \frac{1}{2} |\uparrow\uparrow\rangle + \hbar \frac{1}{2} |\uparrow\uparrow\rangle = \hbar 1 |\uparrow\uparrow\rangle \quad (61)$$

$$\hbar m |A\rangle = \hbar |\uparrow\uparrow\rangle \quad (62)$$

$$m = 1$$

Conclusão: $|A\rangle = |11\rangle$.

Agora vamos deduzir o autoestado $|B\rangle$:

$$S^2 |B\rangle = S^2 \left(\frac{|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle}{\sqrt{2}} \right) = (S^{(1)2} + S^{(2)2} + 2S^{(1)} \cdot S^{(2)}) \left(\frac{|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle}{\sqrt{2}} \right) \quad (63)$$

$$S^2 |B\rangle = \left(\hbar \frac{3}{4} \right) \left(\frac{|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle}{\sqrt{2}} \right) + \left(\hbar \frac{3}{4} \right) \left(\frac{|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle}{\sqrt{2}} \right) + \frac{2\hbar^2}{4\sqrt{2}} (2|\downarrow\uparrow\rangle - |\uparrow\downarrow\rangle + 2|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle) \quad (64)$$

$$\hbar^2 s(s+1) |B\rangle = \hbar^2 2 \left(\frac{|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle}{\sqrt{2}} \right) = \hbar^2 1(1+1) \left(\frac{|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle}{\sqrt{2}} \right) \quad (65)$$

$$s = 1$$

$$S_z |B\rangle = S_z^{(1)} \left(\frac{|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle}{\sqrt{2}} \right) + S_z^{(2)} \left(\frac{|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle}{\sqrt{2}} \right) \quad (66)$$

$$S_z |B\rangle = \frac{\hbar}{2\sqrt{2}} (|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle - |\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle) = 0 \quad (67)$$

$$\hbar m |B\rangle = 0$$

$$m=0$$

Conclusão: $|B\rangle = |10\rangle$.

Agora vamos deduzir o autoestado $|C\rangle$:

$$S^2 |C\rangle = S^2 |\downarrow\downarrow\rangle = S^{(1)2} |\downarrow\downarrow\rangle + S^{(2)2} |\downarrow\downarrow\rangle + 2S^{(1)} S^{(2)} |\downarrow\downarrow\rangle \quad (68)$$

$$\hbar^2 |C\rangle = \hbar^2 \frac{1}{2} \left(\frac{1}{2} + 1 \right) |\downarrow\downarrow\rangle + \hbar^2 \frac{1}{2} \left(\frac{1}{2} + 1 \right) |\downarrow\downarrow\rangle + 2 \frac{\hbar^2}{4} |\downarrow\downarrow\rangle = 2\hbar^2 |\downarrow\downarrow\rangle \quad (69)$$

$$\hbar^2 s(s+1) |C\rangle = \hbar^2 1(1+1) |\downarrow\downarrow\rangle \quad (70)$$

$$s = 1$$

$$S_z |C\rangle = \hbar \frac{-1}{2} |\downarrow\downarrow\rangle + \hbar \frac{-1}{2} |\downarrow\downarrow\rangle = -\hbar |\downarrow\downarrow\rangle \quad (71)$$

$$\hbar m |C\rangle = -\hbar |\downarrow\downarrow\rangle$$

$$m = -1$$

Conclusão: $|C\rangle = |1-1\rangle$.

Agora vamos deduzir o autoestado $|D\rangle$:

$$S^2 |D\rangle = S^2 \frac{|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle}{\sqrt{2}} = S^{(1)2} \frac{|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle}{\sqrt{2}} + S^{(2)2} \frac{|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle}{\sqrt{2}} + 2S^{(1)}S^{(2)} \frac{|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle}{\sqrt{2}} \quad (72)$$

$$S^2 |D\rangle = \left(\hbar^2 \frac{3}{4} \right) \frac{|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle}{\sqrt{2}} + \left(\hbar^2 \frac{3}{4} \right) \frac{|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle}{\sqrt{2}} + \left(\frac{2\hbar^2}{4\sqrt{2}} \right) (2|\downarrow\uparrow\rangle - |\uparrow\downarrow\rangle - 2|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle) \quad (73)$$

$$\hbar^2 s(s+1) |D\rangle = \left(\hbar^2 \frac{6}{4} \right) \frac{|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle}{\sqrt{2}} + \left(-\hbar^2 \frac{6}{4} \right) \frac{|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle}{\sqrt{2}} = 0 \quad (74)$$

$$s = 0$$

$$S_z |D\rangle = \frac{\hbar}{2\sqrt{2}} (|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle - |\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle) = 0 \quad (75)$$

$$\hbar m |D\rangle = 0$$

$$m = 0$$

Conclusão: $|D\rangle = |00\rangle$.

Assim temos a matriz diagonalizada:

$$\vec{S}^{(1)} \cdot \vec{S}^{(2)} = \frac{\hbar^2}{4} \begin{array}{ccccc} & |11\rangle & |10\rangle & |1-1\rangle & |00\rangle \\ \begin{array}{l} |11\rangle \\ |10\rangle \\ |1-1\rangle \\ |00\rangle \end{array} & \begin{array}{l} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{array} & \begin{array}{l} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{array} & \begin{array}{l} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{array} & \begin{array}{l} 0 \\ 0 \\ 0 \\ -3 \end{array} \end{array}$$

Desta forma temos(14):

$$\left\{ \begin{array}{l} |11\rangle = \uparrow\uparrow \\ |10\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(\uparrow\downarrow + \downarrow\uparrow) \\ |1-1\rangle = \downarrow\downarrow \end{array} \right\} s = 1(Tripleto)$$

$$\left\{ |00\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(\uparrow\downarrow - \downarrow\uparrow) \right\} s = 0(singleto)$$

Pela equação (53) e pelo calculo que se segue:

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(\uparrow\downarrow + \downarrow\uparrow) = \frac{\hbar^2}{4} |10\rangle \quad , \quad (76)$$

temos que para a interação ferromagnética o valor esperado é $0,25 \hbar^2$.

Para a interação antiferromagnética temos a formação do singleto logo o valor é dado por:

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(\uparrow\downarrow - \downarrow\uparrow) = \frac{-3\hbar^2}{4} |00\rangle \quad , \quad (77)$$

ou seja $-0,75 \hbar^2$.

Por definição temos (19):

$$\langle O \rangle = \frac{1}{Z} \sum_n \langle n | e^{-\beta H} O | n \rangle = \frac{1}{Z} \sum_n e^{-\beta E_n} \langle n | O | n \rangle \quad , \quad (78)$$

com n sendo os auto-estados $|A\rangle$, $|B\rangle$, $|C\rangle$ e $|D\rangle$.

Onde a função de partição:

$$Z = \sum_n e^{-\beta E_n} \text{ e } \beta = \frac{1}{k_B T}, \text{ onde } k_B \text{ é a constante de Boltzmann}$$

$$O_{(i)(j)} = \langle S^{(i)} \cdot S^{(j)} \rangle . \quad (79)$$

Logo teremos a equação:

$$O_{(1)(2)} = \langle S^{(1)} \cdot S^{(2)} \rangle = \frac{1}{Z} \sum_1^4 e^{-\beta E_n} \langle n | S^{(1)} \cdot S^{(2)} | n \rangle. \quad (80)$$

Pelos cálculos deduzidos em 53, 54 e 55 temos:

$$\langle A | S^{(1)} \cdot S^{(2)} | A \rangle = \frac{\hbar^2}{4}; \quad \langle B | S^{(1)} \cdot S^{(2)} | B \rangle = \frac{\hbar^2}{4}; \quad (81)$$

$$\langle C | S^{(1)} \cdot S^{(2)} | C \rangle = \frac{\hbar^2}{4}; \quad \langle D | S^{(1)} \cdot S^{(2)} | D \rangle = \frac{-3\hbar^2}{4}. \quad (82)$$

Para o cálculo de energia, temos os autovalores E_n , com n correspondendo aos autoestados A, B, C e D:

$$e^{-\beta E_A} = e^{-\beta \frac{\hbar^2}{4}} \equiv e^{-\tilde{\beta}} \quad (83)$$

$$e^{-\tilde{\beta} E_A} = e^{-\tilde{\beta}} \quad e^{-\tilde{\beta} E_B} = e^{-\tilde{\beta}} \quad e^{-\tilde{\beta} E_C} = e^{-\tilde{\beta}} \quad e^{-\tilde{\beta} E_D} = e^{3\tilde{\beta}} \quad (84)$$

aplicando os resultados de 81, 82 e 84 na equação 91 teremos:

$$Z = e^{-\tilde{\beta}} + e^{-\tilde{\beta}} + e^{-\tilde{\beta}} + e^{3\tilde{\beta}} = 3e^{-\tilde{\beta}} + e^{3\tilde{\beta}} \quad (85)$$

$$\langle S^{(1)} \cdot S^{(2)} \rangle = \frac{1}{3e^{-\tilde{\beta}} + e^{3\tilde{\beta}}} (e^{-\tilde{\beta}} \frac{\hbar^2}{4} + e^{-\tilde{\beta}} \frac{\hbar^2}{4} + e^{-\tilde{\beta}} \frac{\hbar^2}{4} - e^{3\tilde{\beta}} \frac{3\hbar^2}{4}) \quad (86)$$

$$\langle S^{(1)} \cdot S^{(2)} \rangle = \frac{3\hbar^2}{4} \left(\frac{e^{-\tilde{\beta}} - e^{3\tilde{\beta}}}{3e^{-\tilde{\beta}} + e^{3\tilde{\beta}}} \right), \quad (87)$$

simplificando os cálculos deduzimos:

$$O_{(1)(2)} = \frac{3\hbar^2}{4} \left(\frac{1 - e^{4\tilde{\beta}}}{3 + e^{4\tilde{\beta}}} \right), \quad (88)$$

Utilizando propriedades das funções hiperbólicas deduzimos o resultado:

Tomando $\frac{3\hbar^2}{4}$ como uma constante e $\frac{\hbar^2}{k_B}$ como outra constante e sabendo que $\tilde{\beta} = \frac{\hbar^2}{k_B T}$, a equação pode ser rescrita como:

$$O_{(1)(2)} = c_1 \left(\frac{1 - e^{\frac{c_2}{T}}}{3 + e^{\frac{c_2}{T}}} \right), \quad (89)$$

temos o gráfico:

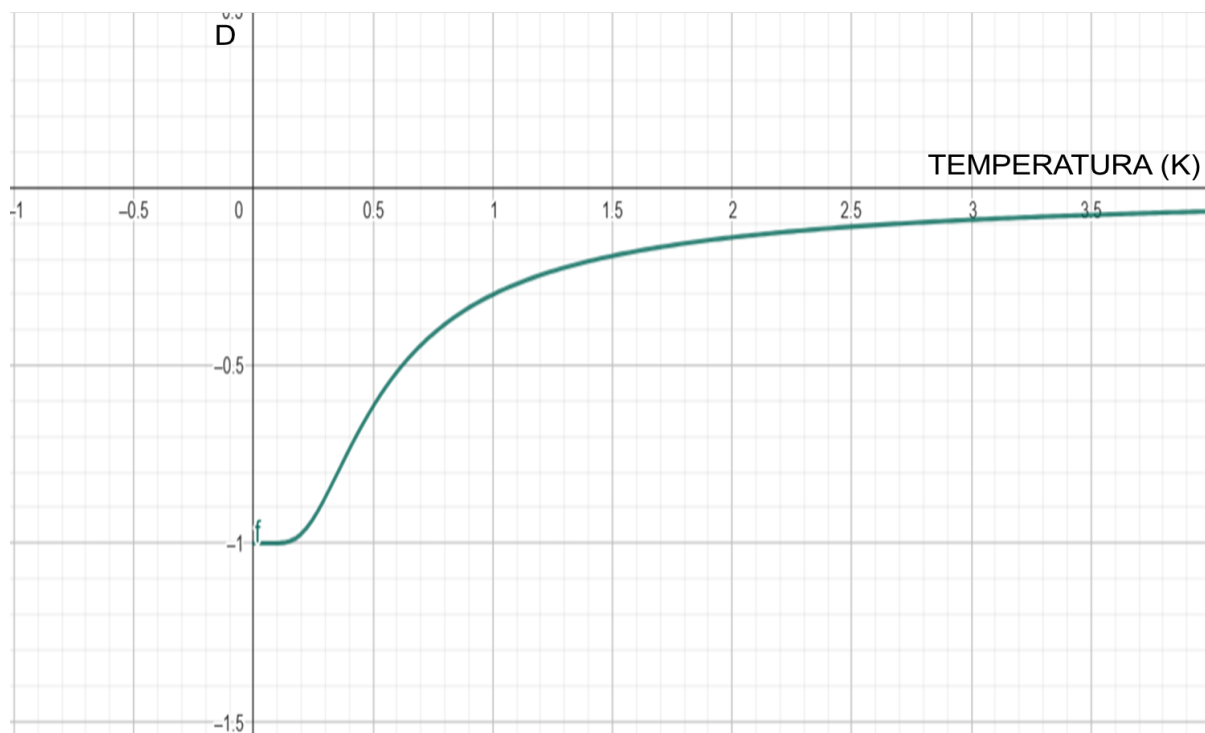


Figura 31 – $O_{(1)(2)}$ em função da temperatura (gerado no site <<https://www.geogebra.org>>)

Agora vamos apresentar o cálculo para 3 spins:

$$\frac{\hat{H}}{-J} = (\vec{S}^{(1)} \cdot \vec{S}^{(2)} + \vec{S}^{(1)} \cdot \vec{S}^{(3)} + \vec{S}^{(2)} \cdot \vec{S}^{(3)}). \quad (90)$$

Em unidades de $\frac{\hbar^2}{4}$

Dada a matriz do hamiltoniano:

	$ \uparrow\uparrow\uparrow\rangle$	$ \uparrow\uparrow\downarrow\rangle$	$ \uparrow\downarrow\uparrow\rangle$	$ \uparrow\downarrow\downarrow\rangle$	$ \downarrow\uparrow\uparrow\rangle$	$ \downarrow\uparrow\downarrow\rangle$	$ \downarrow\downarrow\uparrow\rangle$	$ \downarrow\downarrow\downarrow\rangle$
$\langle\uparrow\uparrow\uparrow $	3	0	0	0	0	0	0	0
$\langle\uparrow\uparrow\downarrow $	0	-1	2	2	0	0	0	0
$\langle\uparrow\downarrow\uparrow $	0	2	-1	2	0	0	0	0
$\langle\uparrow\downarrow\downarrow $	0	2	2	-1	0	0	0	0
$\langle\downarrow\uparrow\uparrow $	0	0	0	0	-1	2	2	0
$\langle\downarrow\uparrow\downarrow $	0	0	0	0	2	-1	2	0
$\langle\downarrow\downarrow\uparrow $	0	0	0	0	2	2	-1	0
$\langle\downarrow\downarrow\downarrow $	0	0	0	0	0	0	0	3

Diagonalizando:

	$ B\rangle$	$ C\rangle$	$ D\rangle$	$ E\rangle$	$ F\rangle$	$ G\rangle$	$ H\rangle$	$ I\rangle$
$\langle B $	3	0	0	0	0	0	0	0
$\langle C $	0	3	0	0	0	0	0	0
$\langle D $	0	0	3	0	0	0	0	0
$\langle E $	0	0	0	3	0	0	0	0
$\langle F $	0	0	0	0	-3	0	0	0
$\langle G $	0	0	0	0	0	-3	0	0
$\langle H $	0	0	0	0	0	0	-3	0
$\langle I $	0	0	0	0	0	0	0	-3

$$O_{12} == \frac{1}{Z} \sum_n e^{-\beta E_n} \langle n | \vec{S}^{(1)} \cdot \vec{S}^{(2)} | n \rangle \quad (91)$$

$$O_{12} = \frac{e^{-\beta E_B} \langle B | \vec{S}^{(1)} \cdot \vec{S}^{(2)} | B \rangle + e^{-\beta E_C} \langle C | \vec{S}^{(1)} \cdot \vec{S}^{(2)} | C \rangle + \dots + e^{-\beta E_I} \langle I | \vec{S}^{(1)} \cdot \vec{S}^{(2)} | I \rangle}{4(e^{-3\beta} + e^{3\beta})} \quad (92)$$

de onde temos:

$$O_{(1)(2)} = \frac{\hbar^2}{4} \left(\frac{e^{-3\tilde{\beta}} - e^{3\tilde{\beta}}}{e^{-3\tilde{\beta}} + e^{3\tilde{\beta}}} \right) = -\frac{\hbar^2}{4} \tanh(3\tilde{\beta}) \quad , \quad (93)$$

temos o gráfico:

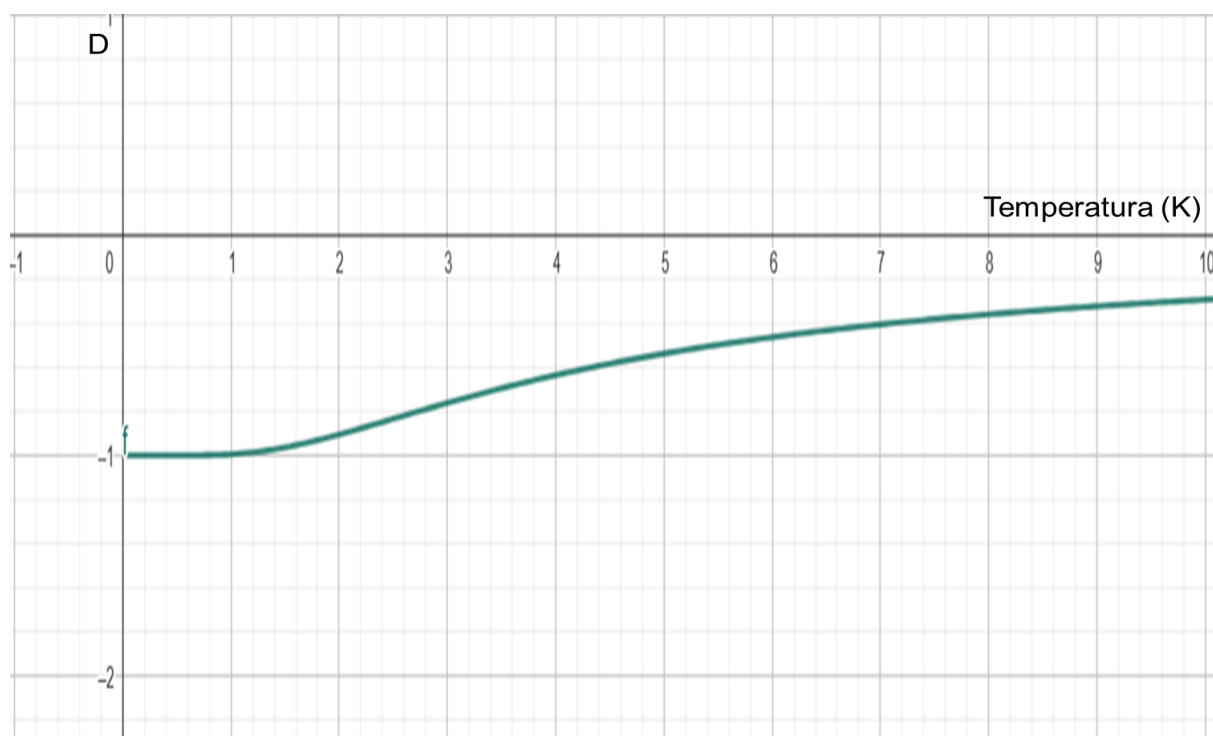


Figura 32 – $O_{(1)(2)}$ em função da temperatura para 3 spins (gerado no site <<https://www.geogebra.org>>)

ANEXO B – Instalação das bibliotecas

Para instalar as bibliotecas de álgebra linear no sistema Unix/Linux execute o comando:

```
sudo apt update
```

```
sudo apt install liblapack-dev libblas-dev
```

Para compilar usamos o comando:

```
gfortran -o executável programa.f90 -llapack -lblas
```

onde o programa executável foi compilado do código programa.f90

As funções utilizadas são:

DSYTRD: Reduz uma matriz simétrica a uma forma tridiagonal;

DORGTR: Recupera uma matriz ortogonal utilizada no processo de tridiagonalização;

DSTEQR: Retorna os autovalores e autovetores da matriz tridiagonal.(27)

ANEXO C – Máquinas

- Máquina virtual interna do Notebook:

Sistema: Ubuntu 24.04.1 LTS

memória: 7.6G

Processador: 11th Gen Intel(R) Core(TM) i5-1135G7 @ 2.40GHz

tempo de processamento para 1 elétron itinerante: 1 minuto e 47 segundos.

- Máquina Lovelace pertencente ao INFI:

Sistema: Debian GNU/Linux 12 (bookworml)

memória: 7.8G

Processador: Intel(R) Core(TM) i7 CPU 860 @ 2.80GHz

tempo de processamento para 1 elétron itinerante: 1 minuto e 29 segundos.

- Máquina lovelace do CENAPAD:

Sistema: Oracle Linux Server 8.8

memória: 60G

Processador: AMD EPYC 7282 16-Core Processor

tempo de processamento para 1 elétron itinerante: 1,5 segundos.

Os processamentos foram medidos para valores antiferromagnéticos de Heisenberg-Kondo isotrópico com $J_z = -0,2 = J_{xy}$

ANEXO D – Método de Lanczos

O método de Lanczos, apresentado por Cornelius Lanczos, (1893–1974) um matemático e físico teórico húngaro-americano, publicado em 1950 (28), se trata de um método iterativo para transformar uma matriz esparsa, grande e simétrica em uma matriz tridiagonal, que em tese é mais simples que a matriz original e deste modo obter os autovalores, que são os mesmos da matriz original, e autovetores. Para tal utilizamos as funções da biblioteca Lapack e Blas, responsável por métodos da álgebra linear, do Fortran, já abordadas no anexo anterior.

Abaixo descrevo o algoritmo do método passo a passo:

Passo 1: Considere H a matriz original, esparsa e simétrica.

Tome v_0 um vetor aleatório normalizado

Passo 2: Defina $v_1 = H|v_0\rangle - |\alpha_0 v_0\rangle$

onde $\alpha_0 = \frac{\langle v_0|H|v_0\rangle}{\langle v_0|v_0\rangle}$

Passo 3: Defina, por recorrência: $v_n = H|v_{n-1}\rangle - \alpha_{n-1}|v_{n-1}\rangle - \beta_{n-2}|v_{n-2}\rangle$

Onde $\beta_{n-2}^2 = \frac{\langle v_{n-1}|v_{n-1}\rangle}{\langle v_{n-2}|v_{n-2}\rangle}$

e $\alpha_{n-1} = \frac{\langle v_{n-1}|H|v_{n-1}\rangle}{\langle v_{n-1}|v_{n-1}\rangle}$

A recorrência continua até $\beta_i = 0$, para algum $i \geq 0$

Passo 4: Obtendo a matriz tridiagonal: A matriz tridiagonal Trd será dada pela relação:
 $\text{Trd}(i,i) = \alpha_i$

$\text{Trd}(i,i-1) = \text{Trd}(i-1,i) = \sqrt{\beta_i}$

Todos os outros valores da matriz tridiagonal Trd são zeros. Como pode ser visto nas págs. 9 a 18 de Alves(29) .

Passo 5: Durante o processo anterior obtemos a matriz ortogonal Q como sendo
 $Q^T H Q = \text{Trd}$

Passo 6: Obter os autovalores e autovetores. Utilizamos a função DSTEQR que opera $\text{Trd} = Z A Z^T$, onde A é a matriz diagonal contendo os autovalores e Z é a matriz cujas colunas são os autovetores ortonormais de Trd.

ANEXO E – Demonstração do método de Lanczos

Passo 1:

Dada uma matriz H simétrica e hermitiana, escolhemos um vetor não nulo v_0 normalizado.

Definimos $v_1 = Hv_0 - \alpha_0 v_0$

Logo

$$v_1 = (H - \alpha_0 I)v_0$$

De onde

$$\begin{aligned} v_1 v_1 &= [(H - \alpha_0 I)v_0][(H - \alpha_0 I)v_0] = [Hv_0 - \alpha_0 v_0]^2 \\ &= v_0 H^2 v_0 - \alpha_0 v_0 H v_0 - \alpha_0 v_0 H v_0 + \alpha_0^2 v_0 v_0 \\ &= v_0 H^2 v_0 - 2\alpha_0 v_0 H v_0 + \alpha_0^2 v_0 v_0 \end{aligned}$$

Assim o menor valor de α_0 é quando a derivada se anula, ou seja:

$$\frac{\partial v_1 v_1}{\partial \alpha_0} = 0 = -2v_0 H v_0 + 2\alpha_0 v_0 v_0$$

Portanto $\alpha_0 = \frac{2v_0 H v_0}{2v_0 v_0} = \frac{v_0 H v_0}{v_0 v_0}$

Passo 2:

Observar que:

$$\text{I) } v_0 v_1 = 0, \text{ pois: } v_0 v_1 = v_0 H v_0 - \alpha_0 v_0 v_0 = v_0 H v_0 - \frac{v_0 H v_0}{v_0 v_0} v_0 v_0 = 0$$

$$\text{II) } v_0 H v_1 = v_1 v_1:$$

$$\text{Basta notar que: } v_1 v_1 = v_1 [H v_0 - \alpha_0 v_0] = v_1 H v_0 - \frac{v_0 H v_0}{v_0 v_0} v_1 v_0 = v_0 H v_1$$

Deduzido nas págs. 12 e 13 de Dagotto(30).

$$\text{III) Considere } v_2 = H v_1 - \alpha_1 v_1 - \beta_0 v_0 = (H - \alpha_1 I)v_1 - \beta_0 v_0$$

$$v_2 v_2 = [(H - \alpha_1 I)v_1 - \beta_0 v_0][(H - \alpha_1 I)v_1 - \beta_0 v_0]$$

$$v_2 v_2 = v_1 H^2 v_1 - 2\alpha_1 v_1 H v_1 + \alpha_1^2 v_1 v_1 - \beta_0 v_1 H v_0 + \beta_0 \alpha_1 v_1 v_0 - 2\beta_0 v_0 H v_1 + \beta_0 \alpha_1 v_0 v_1 + \beta_0^2 v_0 v_0$$

Como em I) demonstramos que $v_0 v_1 = v_1 v_0 = 0$, para encontrar o mínimo de $\alpha_1 e \beta_0$ devemos zerar a derivada nos respectivos termos então teremos após a derivação e igualando a zero:

$$\alpha_1 = \frac{2v_1 H v_1}{2v_1 v_1} = \frac{v_1 H v_1}{v_1 v_1}$$

e incluindo o demonstrado em II)

$$\beta_0 = \frac{2v_0 H v_1}{2v_0 v_0} = \frac{v_1 v_1}{v_0 v_0}$$

Passo 3:

Por simplicidade usaremos $\alpha_n = \alpha$ e $\beta_{n-1} = \beta$.

Generalizando, considere o vetor não nulo definido por $v_{n+1} = H v_n - \alpha v_n - \beta v_{n-1} - \gamma$.
Vamos mostrar que $\gamma = 0$.

De fato:

$$\begin{aligned} v_{n+1} v_{n+1} &= [H v_n - \alpha v_n - \beta v_{n-1} - \gamma]^2 \\ v_{n+1} v_{n+1} &= [(H - \alpha I) v_n - (\beta v_{n-1} + \gamma)]^2 \\ &= v_n H^2 v_n - 2\alpha v_n H v_n + \alpha^2 v_n v_n - 2\beta v_n H v_{n-1} - 2\gamma v_n H + 2\alpha\beta v_n v_{n-1} + 2\alpha\gamma v_n + \\ &\quad \beta^2 v_{n-1} v_{n-1} + 2\beta\gamma v_{n-1} + \gamma^2 \end{aligned}$$

Logo derivando em relação a γ e igualando a zero temos: $\gamma = H v_n - \alpha v_n - \beta v_{n-1}$

Porém $v_n \neq 0$, assim γ é nulo por vacuidade

Por outro lado podemos facilmente deduzir que:

$$\alpha = \frac{v_n H v_n - \beta v_n v_{n-1} - 2\gamma v_n}{v_n v_n} = \frac{v_n H v_n}{v_n v_n}$$

e

$$\beta = \frac{v_n H v_{n-1} - 2\alpha v_n v_{n-1} - 2\gamma v_{n-1}}{v_{n-1} v_{n-1}} = \frac{v_n v_n}{v_{n-1} v_{n-1}}$$

Referências

- 1 URAGA, S.; TADA, Y. Spin nematic order and superconductivity in J_1-J_2 kondo lattice model on the square lattice. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 111, p. 075110, Feb 2025. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.111.075110>>.
- 2 BRAZ, L. B.; NAG, T.; BLACK-SCHAFFER, A. M. Competing magnetic states on the surface of multilayer abc-stacked graphene. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 110, p. L241401, Dec 2024. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.110.L241401>>.
- 3 LACROIX C.; MENDELS, P.; MILA, F. *Introduction to Frustrated Magnetism: Materials, Experiments, Theory*. 1. ed. Heidelberg, Alemanha: Springer, 2011. ISBN 978-3-642-10588-3. Disponível em: <<https://link.springer.com/book/10.1007/978-3-642-10589-0>>.
- 4 KONDO, J. Resistance minimum in dilute magnetic alloys. *Progress of Theoretical Physics*, v. 32, n. 1, p. 37–49, 1964. Disponível em: <<http://ptp.oxfordjournals.org/content/32/1/37.abstract>>.
- 5 CHANDRASEKHAR V.; HAESSENDONCK, C. V. A. (Ed.). *Kondo Effect and Dephasing in Low-Dimensional Metallic Systems*. Pécs, Hungria: Springer Netherlands, 2001. Disponível em: <<https://link.springer.com/book/10.1007/978-94-010-0427-5>>.
- 6 CAPELLE, K.; CAMPO, V. L. Density functionals and model hamiltonians: Pillars of many-particle physics. *Physics Reports*, v. 528, n. 3, 2013. ISSN 0370-1573. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0370157313000975>>.
- 7 NASCIMENTO, R. M. L.
Frustração magnética em um modelo de Ising triangular com anisotropia rotacional — UFGO, UNIVERSIDADE FEDERAL DE GOIÁS, 2020. Disponível em: <<https://repositorio.bc.ufg.br/tedeserver/api/core/bitstreams/b478b12e-049e-4acd-82e4-042896f4b7bb/content>>.
- 8 GINGRAS, M. J. P. Spin ice. *Department of Physics and Astronomy, University of Waterloo*, 2009. Disponível em: <https://www.researchgate.net/publication/24164782_Spin_Ice>.
- 9 SHIMIZU, Y. et al. Spin liquid state in an organic mott insulator with a triangular lattice. *Physical Review Letters*, American Physical Society (APS), v. 91, n. 10, set. 2003. ISSN 1079-7114. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.91.107001>>.
- 10 BITTENCOURT, R. C. d. A.
Nanomolécula frustrada com interação Kondo — UFMS, Universidade de Mato Grosso do Sul., 2023. Disponível em: <<https://repositorio.ufms.br/handle/123456789/9078>>.
- 11 KITTEL, C. *Introduction to Solid State Physics*. 8. ed. New York: Wiley, 2005. Disponível em: <<http://metal.elte.hu/~groma/Anyagtudomany/kittel.pdf>>.

- 12 NETO, A. H. C. et al. The Electronic Properties of Graphene. *Reviews of Modern Physics*, v. 81, n. 1, p. 109–162, 2009. Disponível em: <<https://journals.aps.org/rmp/abstract/10.1103/RevModPhys.81.109>>.
- 13 OLIVEIRA, I. *Introdução à Física do Estado Sólido*. LIVRARIA DA FISICA, 2005. ISBN 9788588325456. Disponível em: <<https://books.google.com.br/books?id=LsI3naqT7ZYC>>.
- 14 GRIFFITHS, D. J. *Mecânica Quântica*. 2. ed. São Paulo, Brasil: Pearson, 2011. ISBN 9788576059271. Disponível em: <http://wigner.elte.hu/koltai/griffiths_quantum_mechanics_2nd_edition.pdf>.
- 15 Quantummadesimple. *Frustrated magnets*. 2021. Acessado em 23 de Julho de 2025. Disponível em: <<https://toutestquantique.fr/en/frustrated-magnets/>>.
- 16 FERREIRA J. V. B.; PEREIRA, L. C. Determinação da temperatura kondo a partir de curvas de susceptibilidade magnética em regime não líquido de fermi. *Revista Matéria*, p. 2–4, 2013. ISSN 1517-7076. Disponível em: <<https://www.scielo.br/j/rmat/a/5kQfqPqyqDmDpKwBZqWV4jp/?format=pdf&lang=pt>>.
- 17 JUNIOR, J. L. F. S. *Efeito Kondo e magnetismo em uma rede Kagome* — UFRS, Universidade do Rio Grande do Sul., 2012. Disponível em: <<http://hdl.handle.net/10183/53142>>.
- 18 XIE, N.; YANG, Y.-f. Interplay of localized and itinerant behavior in the one-dimensional kondo-heisenberg model. *Physical Review B*, American Physical Society (APS), v. 91, n. 19, maio 2015. ISSN 1550-235X. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.91.195116>>.
- 19 SANDVIK, A. W.; AVELLA, A.; MANCINI, F. Computational studies of quantum spin systems. AIP, 2010. ISSN 0094-243X. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1063/1.3518900>>.
- 20 BLACK-SCHAFFER, A. M. Rkky coupling in graphene. *Physical Review B*, American Physical Society (APS), v. 81, n. 20, maio 2010. ISSN 1550-235X. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.81.205416>>.
- 21 SHERAFATI, M.; SATPATHY, S. Analytical expression for the rkky interaction in doped graphene. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 84, p. 125416, Sep 2011. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.84.125416>>.
- 22 MOTT, N. F. Metal-insulator transition. *Rev. Mod. Phys.*, American Physical Society, v. 40, p. 677–683, Oct 1968. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.40.677>>.
- 23 LIN, A. *8.051: Quantum Physics II — Lecture Notes*. 2020. <<https://web.stanford.edu/~lindrew/8.051.pdf>>. Lecturer: Barton Zwiebach. Spring 2020. Acesso em: 30 set. 2025.
- 24 TROYER, M. *Computational Quantum Physics*. 2005. Lecture notes, ETH Zürich. Disponível em: <<https://share.phys.ethz.ch/~alps/cqp.pdf>>.

- 25 SCHINDELIN, J. et al. Spin correlation functions and susceptibilities in the easy-plane xxz chain. *arXiv preprint*, 1999. Disponível em: <<https://arxiv.org/abs/cond-mat/9911447>>.
- 26 FORNOVILLE, M. et al. Easy-axis and easy-plane anisotropies in the xxz model. *Physical Review B*, v. 111, p. 115428, 2025.
- 27 ISO/IEC Committee. *Programming Languages — Fortran (ISO/IEC 1539-1:2018)*. Geneva: [s.n.], 2018. ISO/IEC Standard 1539-1:2018, 3rd ed. Disponível em: <<https://www.iso.org/standard/82170.html>>.
- 28 LANCZOS, C. An iteration method for the solution of the eigenvalue problem of linear differential and integral operators. *Journal of Research of the National Bureau of Standards*, 1950. Disponível em: <https://ia800204.us.archive.org/9/items/jresv45n4p255/jresv45n4p255_A1b.pdf>.
- 29 ALVES, D.
O método de Lanczos e a sua comparação com a Teoria de Perturbações em Mecânica Quântica — Universidade Estadual de Campinas., 1993. Disponível em: <<https://repositorio.unicamp.br/Acervo/Detalhe/69739>>.
- 30 DAGOTTO, E. Correlated electrons in high-temperature superconductors. *Reviews of modern Physics*, American Physical Society, v. 66, p. 774, jul 1994. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.66.763>>.