

Paulo Guilherme Batista Shiota

# **Temperatura Kondo do Modelo de Anderson de Dois Canais**

Campo Grande

2018

Paulo Guilherme Batista Shiota

# **Temperatura Kondo do Modelo de Anderson de Dois Canais**

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

Orientador: Prof. Dr. João Vítor Batista Ferreira

Coorientador: Prof. Dr. Fábio Mallmann Zimmer

Campo Grande

2018

*Este trabalho é dedicado aos meus pais, por oferecerem apoio incondicional, ao meu avô Edmir, por ter acendido em mim a chama da curiosidade, e principalmente a minha esposa e musa inspiradora, Griscele, presente nas horas mais difíceis.*

# Agradecimentos

Ao meu orientador, professor João Vítor, por sua paciência e dedicação.

Aos professores Fábio e Isabela e ao amigo Christian pelas discussões e contribuições a este trabalho.

*Tyger Tyger, burning bright,  
In the forests of the night;  
What immortal hand or eye,  
Could frame thy fearful symmetry?  
(William Blake, Songs of Experience)*

# Resumo

A temperatura Kondo ( $T_K$ ) é um parâmetro essencial para a análise da interação antiferromagnética entre um spin localizado e o spin das partículas em um banho fermiônico. Há várias definições do modelo de Anderson de um canal presentes na literatura, uma delas exige que a temperatura Kondo universalize o comportamento da susceptibilidade magnética da impureza. Essa versão também é válida no modelo de Anderson de dois canais, onde um spin localizado interage com duas bandas de condução, cada uma representada por um canal com seu próprio acoplamento. Se o acoplamento é diferente, o modelo exhibe o bem conhecido regime líquido de Fermi. Se os acoplamentos forem iguais, o modelo exhibe o regime não-líquido de Fermi. Mesmo assim, ainda temos o comportamento universal da susceptibilidade magnética e conseguimos calcular numericamente  $T_K$ . Usamos o método do Grupo de Renormalização Numérica para fazer um estudo sistemático da temperatura Kondo para diferentes valores dos parâmetros do modelo de Anderson de dois canais e propomos expressão matemática que descreva  $T_K$ .

**Palavras-chave:** Temperatura Kondo. Modelo de Anderson. Efeito Kondo. Líquido de Fermi. Não-líquido de Fermi.

# Abstract

The Kondo Temperature ( $T_K$ ) is an essential parameter to the analysis of the antiferromagnetic interaction between a localized spin and the spin of particles in a fermionic bath. There are many definitions of the one-channel Anderson Model presented in the literature, one of them being a version that demands the Kondo Temperature to universalize the behavior of the impurity magnetic susceptibility. This version is also valid in the two-channel Anderson model, where a localized spin interacts with two conduction bands, each represented by a channel with its own coupling. If the coupling is different, the model exhibits the well known Fermi Liquid regime. Whether the couplings are equal, the model displays a non-Fermi Liquid regime. Nevertheless, we still have the universal behavior of the magnetic susceptibility and are able to numerically calculate  $T_K$ . We used Numerical Renormalization Group to perform a systematic study of the Kondo Temperature for different values of the parameters in the two-channel Anderson model and then propose an expression that describes  $T_K$ .

**Keywords:** Kondo Temperature. Anderson Model. Kondo Effect. Fermi Liquid. Non-Fermi Liquid.

# Lista de abreviaturas e siglas

GRN            Grupo de Renormalização Numérica

MADC        Modelo de Anderson de dois canais

$T_K$         Temperatura Kondo



# Sumário

<b>1</b>	<b>INTRODUÇÃO</b>	<b>9</b>
<b>2</b>	<b>OBJETIVOS</b>	<b>10</b>
<b>3</b>	<b>REFERENCIAIS TEÓRICOS</b>	<b>11</b>
3.1	Efeito Kondo: histórico	11
3.2	Modelo de Kondo	15
3.3	Modelo de Anderson	17
3.4	Modelo de Anderson de Dois Canais - MADC	18
3.5	Transformação de Schrieffer-Wolff	21
3.6	Grupo de Renormalização Numérica - GRN	21
3.7	Teoria do Líquido de Fermi	22
3.8	Teoria do não Líquido de Fermi	22
3.9	Susceptibilidade magnética	23
3.10	Temperatura Kondo	24
<b>4</b>	<b>RESULTADOS E DISCUSSÃO</b>	<b>28</b>
4.1	Impureza acoplada a só um canal ( $V_1 \neq 0$ e $V_2 = 0$ )	30
4.2	Impureza acoplada igualmente aos dois canais ( $V_1 = V_2$ )	33
4.3	Impureza acoplada aos dois canais ( $V_1, V_2$ )	36
4.3.1	Impureza acoplada aos dois canais: $V_2 \leq V_1$	36
4.3.2	Impureza acoplada aos dois canais: $V_2 \geq V_1$	38
<b>5</b>	<b>CONCLUSÃO</b>	<b>43</b>
	<b>REFERÊNCIAS</b>	<b>45</b>

# 1 Introdução

O efeito Kondo tem sido t3pico de cont3nuo interesse e pesquisa (1). Desde sua descoberta nos anos 1930 (2) e posterior explica33o nos anos 1960 (3), ainda 3 uma 3rea de interesse tanto para experimentalistas como te3ricos. Primeiramente detectado em ligas met3licas dilu3das, tamb3m 3 observado em sistemas de pontos qu3nticos (4), o que explica o interesse renovado no fen3meno (5). Esse efeito 3 a intera33o entre um 3tomo magn3tico e os el3trons de um metal n3o magn3tico. Este 3tomo, denominado de impureza magn3tica, possui spin n3o nulo que causa espalhamento nos el3trons de condu33o em fun33o da temperatura do sistema. O efeito Kondo 3 um problema de muitos corpos e v3rios modelos s3o usados para descrev3-lo, por exemplo, modelo de Kondo, modelo de Anderson, etc. Os hamiltonianos destes modelos s3o, em geral, escritos em linguagem de segunda quantiza33o (operadores de cria33o e destrui33o de part3culas).

3 poss3vel observar experimentalmente, em temperaturas suficientemente baixas, o efeito Kondo em dados experimentais de resistividade el3trica, suscetibilidade magn3tica e calor espec3fico eletr3nico (6). Usualmente se define um par3metro para indicar a faixa de temperatura em que este fen3meno aparece, sendo denominado de temperatura Kondo ( $T_K$ ). O valor deste par3metro depende de vari3veis f3sicas do modelo utilizado e v3rios pesquisadores prop3em diferentes abordagens te3ricas para definir este valor: a primeira surgiu da aplica33o da teoria da perturba33o no hamiltoniano do modelo de Kondo, depois foi sugerido um m3todo gr3fico aproveitando dados pela diagonaliza33o num3rica do hamiltoniano do modelo de Anderson (7).

No presente trabalho utilizou-se os dados num3ricos obtidos da diagonaliza33o do hamiltoniano do modelo de Anderson de dois canais (*MADC*) pela t3cnica do Grupo de Renormaliza33o Num3rica (*GRN*). Estes dados num3ricos correspondem a valores de temperatura Kondo para diferentes valores de par3metros f3sicos deste modelo (8). Para cada conjunto de valores de vari3veis f3sicas determinou-se a temperatura Kondo  $T_K$  pelo m3todo gr3fico elaborado por Krishna-Murthy et al. (9).

## 2 Objetivos

Este projeto de pesquisa teve por objetivo realizar um estudo sistemático da temperatura Kondo e a sua dependência dos parâmetros físicos do MADC. Primeiro foi verificado que o valor da temperatura Kondo obtido pelo método gráfico é capaz de universalizar as curvas de suscetibilidade magnética em função da temperatura, o que comprova a eficiência deste procedimento. Depois foram discutidos vários procedimentos analíticos de teoria de perturbação usados na literatura para determinar uma expressão para temperatura Kondo. Por fim é proposta expressão matemática para  $T_K$  por meio de ajustes de curvas com os dados numéricos do MADC.

## 3 Referenciais teóricos

### 3.1 Efeito Kondo: histórico

Denomina-se Efeito Kondo como a interação antiferromagnética entre os spins dos elétrons da banda de condução de um material e o spin de um átomo magnético incrustado neste material (3). Este fenômeno depende da temperatura do sistema, tal que, em temperatura suficientemente baixa, em alguns casos o spin deste átomo pode ser completamente anulado pelos spins dos elétrons e o conjunto átomo mais elétrons em volta formam uma "quase-partícula" com momento magnético nulo. O Efeito Kondo pode ser observado em propriedades termodinâmicas: foi primeiramente detectado na resistividade em função da temperatura, mas também aparece no calor específico eletrônico e na suscetibilidade magnética do material.

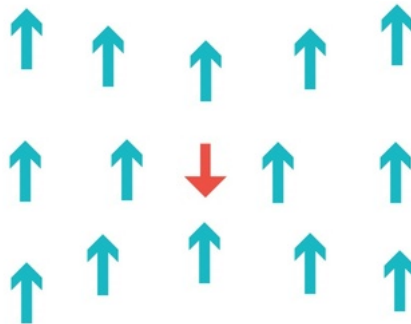


Figura 1 – Representação do spin da impureza (cor vermelha) e dos spins dos elétrons de condução (cor azul). Na interação antiferromagnética os spins da impureza e dos elétrons de condução se alinham antiparalelamente.

O efeito Kondo foi inicialmente detectado na década de 1930 (2), quando medidas da resistividade elétrica em metais não magnéticos contendo quantidades muito pequenas de metais de transição (V, Cr, Mn, Mo, Re, Os, Fe, Co, Ni) apontavam para a ocorrência de um mínimo na resistividade antes de 0 K (ver figura 2). Experimentalmente observou-se que a ocorrência do mínimo na resistividade estava associada à detecção de momentos magnéticos localizados (10) pela medida da susceptibilidade magnética. Estes átomos de elementos diferentes da maioria dos átomos da rede cristalina passaram a ser denominados de impurezas magnéticas.

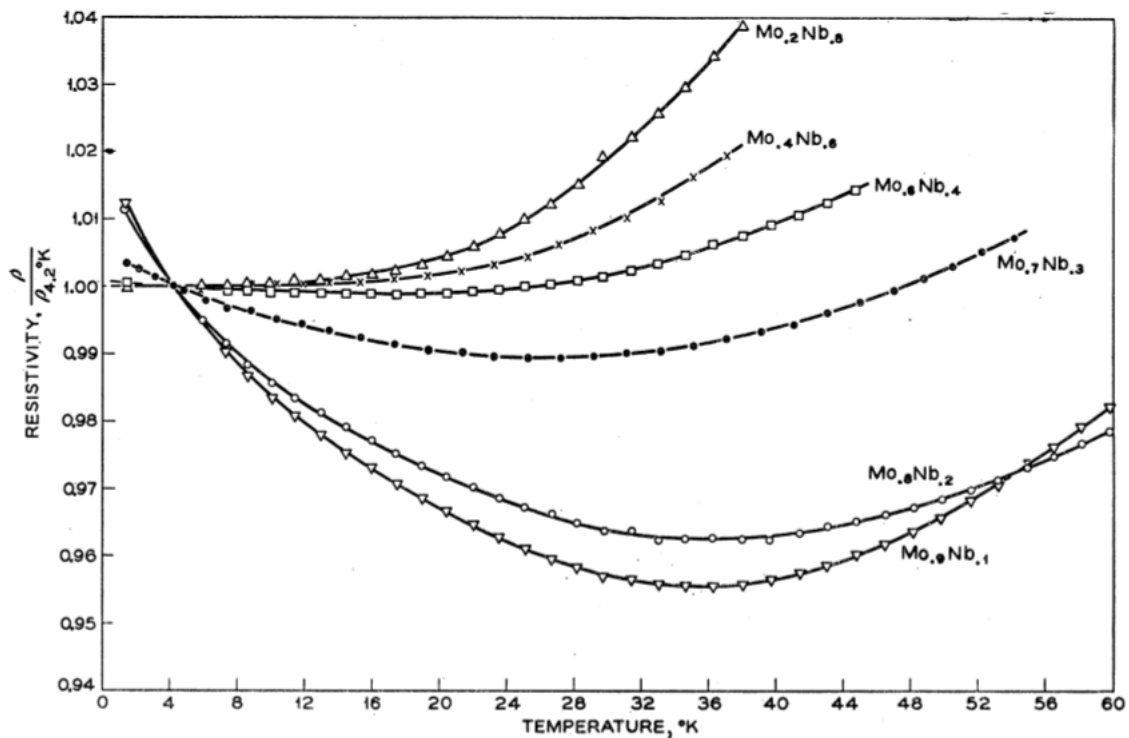


Figura 2 – Dados experimentais da resistividade elétrica de uma série de ligas de Mo-Nb com 1% de Fe (10). As resistividades estão normalizadas em 4,2 K. Para diversas concentrações de Mo e Nb há a ocorrência do mínimo da resistividade antes de 0 K.

A explicação deste fenômeno só se deu na década de 1960. Em 1964, Jun Kondo publicou o artigo seminal (3) que explicava como o efeito surgia e calculava o termo da resistividade que estava faltando. Kondo argumentou que o mínimo na resistividade elétrica era uma consequência direta da interação entre o spin localizado e o spins dos elétrons de condução. O ponto de partida foi o modelo s-d, posteriormente chamado de modelo de Kondo, e ao aplicar teoria de perturbação em terceira ordem na interação de troca que acopla o spin localizado com os spins de condução, Kondo mostrou como consequência o espalhamento dos elétrons de condução próximos ao nível de Fermi, e uma contribuição logarítmica da temperatura surge como o termo da resistividade associado ao efeito Kondo. Assim, o 'quebra-cabeça' aparentemente estava resolvido.

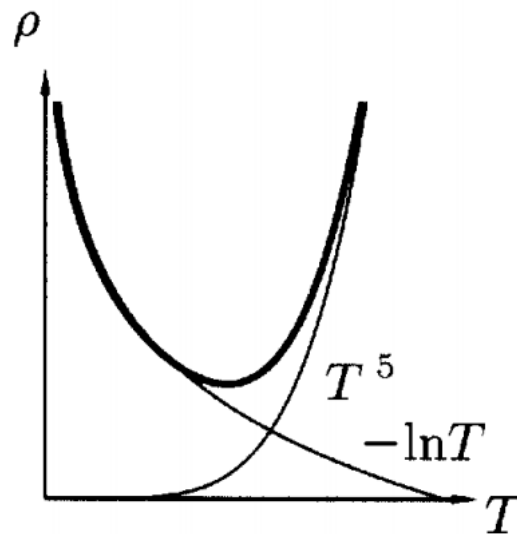


Figura 3 – Gráfico da resistividade  $\rho$  de um metal com impureza magnética em função da temperatura  $T$  (11). A resistividade é descrita por:  $\rho(T) \propto \rho_0 + \rho_1 T^5 - \rho_2 \ln \frac{k_B T}{D}$ .  $\rho_0$ ,  $\rho_1$  e  $\rho_2$  são constantes que dependem do material,  $k_B$  é a constante de Boltzmann e  $D$  é a largura da banda de condução. O primeiro termo é a contribuição da impureza, o termo  $T^5$  é a contribuição dos fônons e o logaritmo é a contribuição do efeito Kondo.

A solução dada por J. Kondo criou o chamado "problema Kondo". O termo logarítmico da resistividade divergia para temperaturas tendendo a zero. Infelizmente, o resultado obtido pela teoria da perturbação não era válido para temperaturas muito baixas para o caso de interações antiferromagnéticas. Assim surgiu a ideia da Temperatura Kondo  $T_K$  (12, 13), que delimitaria a validade dos resultados até então obtidos. Os anos 1960 foram marcados então, pela busca por resultados para  $T < T_K$ .

Ainda na década de 1960, a discussão acerca de estados magnéticos localizados não se restringia ao modelo Kondo. P. W. Anderson analisou as condições para a presença e ausência de momentos magnéticos em metais, e sugeriu (14) que o calor específico e a susceptibilidade magnética são influenciados pelo momento magnético da impureza em baixas temperaturas. Esse modelo posteriormente seria conhecido como modelo de Anderson.

Apenas em 1966 ficou claro que os modelos de Kondo e o de Anderson estavam relacionados. Schrieffer e Wolff usaram uma transformação canônica (15) e demonstraram que no caso mais favorável para a ocorrência de momento magnético localizado, os modelos seriam equivalentes, tornando o modelo de Kondo um caso particular do modelo de Anderson. Além disso, o modelo de Anderson apresentava anomalias em baixas temperaturas similares ao do problema Kondo.

Na década seguinte, era dado outro passo na busca de uma solução para o problema

Kondo. Anderson (16), Abrikosov e Migdal (17) e Fowler e Zawadowski (18) usaram as ideias do grupo de renormalização para reduzir a escala de energia da banda de condução eletrônica de modo a obter apenas a energia relevante para o efeito Kondo. No caso de interação antiferromagnética, as divergências continuavam quando a semi-largura de energia da banda se aproximava de  $k_B T_K$  ( $k_B$  é a constante de Boltzmann).

As propriedades termodinâmicas para  $T < T_K$  do modelo Kondo só vieram a ser parcialmente elucidadas em 1975 (7). Kenneth G. Wilson desenvolveu o GRN, um método não perturbativo que discretiza numericamente o Hamiltoniano do sistema por meio de escalas logarítmicas, levando em conta somente as escalas de energia relevantes ao fenômeno. Finalmente tínhamos resultados para baixas, altas e temperaturas intermediárias a  $T_K$ . Grandezas físicas como a magnetização, susceptibilidade magnética, resistividade e calor específico passavam a depender apenas de  $\ln(T/T_K)$ , exibindo comportamento universal para  $T \ll T_K$ . Logo, seguiu-se o mesmo tratamento para o modelo de Anderson, realizado por Krishna-murthy et al (9).

Os resultados numéricos obtidos pelo GRN vieram a ser confirmados pela solução analítica exata do modelo de Kondo, encontrada independentemente por Wiegmann (19) e Andrei (20) em 1980. Novamente, o modelo de Anderson seguiu pelo mesmo tratamento (21).

Com o avanço das técnicas experimentais, desde a solução analítica exata até o presente momento observou-se que os modelos teóricos existentes não eram suficientes para descrever todos os metais reais e novas ligas metálicas produzidas. Surgiram, então, diversos novos modelos para explicar estes novos materiais: modelos de multi-impurezas (22) ou modelos de multi-canais (23). O conceito de canal foi introduzido por Nozières e Blandin (24), que mostraram ser possível reproduzir os efeitos do campo cristalino em torno do átomo magnético assumindo que este interage com os elétrons de condução através de dois ou mais mecanismos (ressonância em energia). Cada mecanismo é identificado por um fator de acoplamento e é denominado de canal. Afirmar que determinado elétron de condução pertence a um dado canal, significa simplesmente que ele interage com o átomo magnético via o respectivo mecanismo. Isto é equivalente a afirmar que a banda de condução eletrônica foi separada energeticamente em duas faixas de valores. Se anteriormente o efeito Kondo de dois canais era apenas uma possibilidade exótica da matéria, com o advento e domínio tecnológico dos átomos artificiais, os pontos quânticos, a construção de um sistema com duas bandas de condução interagindo com um spin localizado passou a ser possível e sua detecção finalmente se tornou realidade (4).

Por simplicidade de nomenclatura e tradição, as expressões modelo de Kondo e modelo de Anderson referem-se ao modelo tradicional de um canal.

A escolha pelo modelo de Anderson de dois canais (MADC) para esta dissertação se justifica pelas possibilidades que o modelo oferece, além de reproduzir o comportamento

líquido de Fermi, que descreve o comportamento de metais em baixas temperaturas, a existência de mais um canal de acoplamento permite o comportamento não líquido de Fermi, com sua ocorrência nos metais não convencionais (25). O efeito Kondo continua a despertar o interesse de teóricos (1) e experimentalistas (26), pois apesar do problema Kondo estar bem definido, ele ainda é uma área que possibilita testar novas ferramentas numéricas e analíticas que podem ser aplicadas em outros problemas de muitos corpos (27).

Na próxima seção vamos apresentar estes conceitos com mais detalhes.

## 3.2 Modelo de Kondo

Representa um átomo com spin resultante não nulo incrustado em um metal não magnético. Este átomo é denominado de impureza magnética e o metal não magnético é representado por uma banda condução eletrônica. Este modelo foi usado por J. Kondo para explicar a ocorrência do mínimo na resistividade elétrica pouco acima da temperatura de  $0K$  em ligas magnéticas diluídas. Originalmente era também conhecido como modelo  $s - d$ .

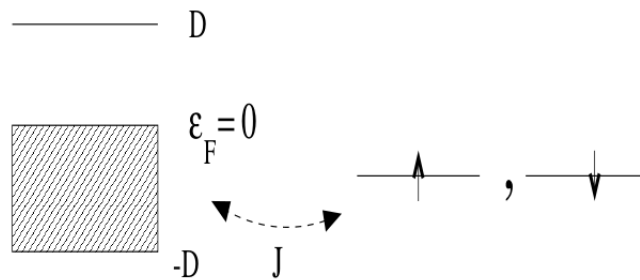


Figura 4 – Modelo de Kondo. O metal não magnético é representado por uma banda de condução semi-preenchida e isotrópica. A impureza magnética é representado por dois estados quânticos com a mesma energia: um deles tem o spin para cima  $\sigma = 1/2$  e o outro com spin para baixo  $\sigma = -1/2$ . Retirado da referência (28).

A figura 4 representa o modelo de Kondo: o metal não magnético é representado por uma banda de condução com largura em energia de  $2D$  (assume-se  $D \approx 5eV$ ), semi-preenchida, isotrópica e com o nível de Fermi considerado com o valor de energia igual a zero. Os elétrons de condução têm energia  $\epsilon_k$ , momentum  $\vec{k}$  (como a banda é isotrópica a energia não depende da direção de  $\vec{k}$ ) e spin  $\sigma = \pm 1/2$ . A impureza é representada por dois estados quânticos com a mesma energia (degenerados). A impureza não pode perder ou ganhar elétron da banda de condução, por isso ela têm valência fixa. Os estados quânticos da impureza se diferenciam pela orientação do spin: um deles tem o spin para cima  $\sigma = 1/2$  e o outro com spin para baixo  $\sigma = -1/2$ . O parâmetro  $J$  representa



o acoplamento entre a impureza e os elétrons de condução. Também conhecido como termo de troca (*exchange*), ele tem como origem a sobreposição das funções de onda das partículas envolvidas (não confundir com o momento angular total). Se  $J < 0$  ( $J > 0$ ) a interação é antiferromagnética (ferromagnética): o spin da impureza e os spins dos elétrons de condução devem ser antiparalelos (paralelos). Quando  $J < 0$ , o espalhamento dos elétrons da banda de condução pela impureza faz com que ela apresente alternância entre os seus dois estados.

Em linguagem de segunda quantização, o Hamiltoniano de Kondo é dado por:

$$H = \sum_{k,\sigma} \epsilon_k c_{k,\sigma}^\dagger c_{k,\sigma} - J \vec{s} \cdot \vec{S}, \quad (3.1)$$

sendo  $c_{k,\sigma}^\dagger$  um operador que cria um elétron na banda de condução com energia  $\epsilon_k$  e com spin  $\sigma = \pm 1/2$ . O mesmo operador sem o símbolo  $\dagger$  destrói o elétron. O produto  $\vec{s} \cdot \vec{S}$  representa a interação entre o spin do elétron de condução e o spin da impureza e pode assumir os valores  $+1$  quando são paralelos e  $-1$  quando são antiparalelos. Se  $J < 0$ , o acoplamento é antiferromagnético e caso seja suficientemente forte, os elétrons de condução blindam o spin da impureza: o sistema perde o caráter magnético.

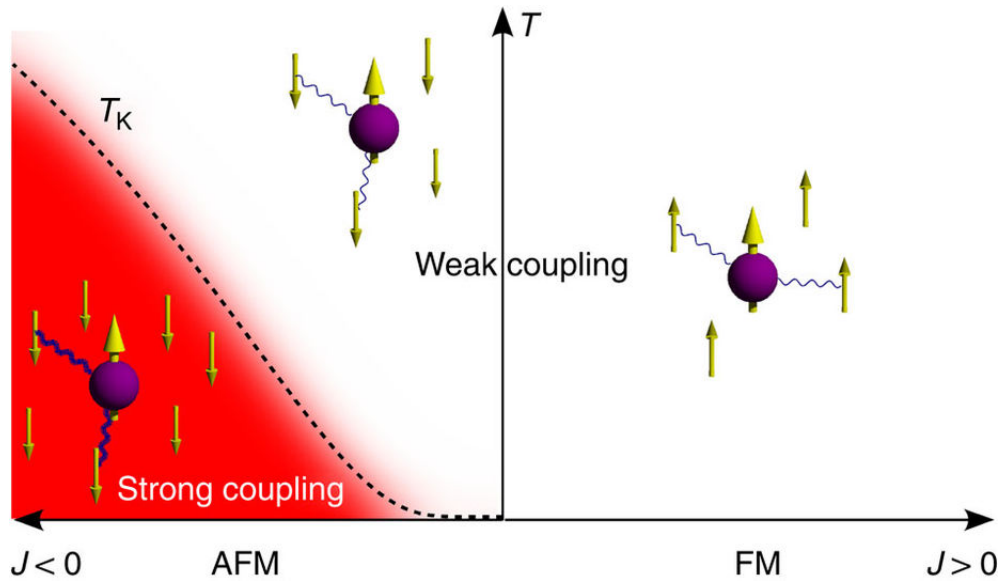


Figura 5 – Os diferentes regimes do efeito Kondo (5). Para a interação de troca  $J < 0$ , o acoplamento é antiferromagnético (AFM). Os elétrons de condução tendem a alinhar seu spin de modo antiparalelo ao spin da impureza. Abaixo do valor de  $T_K$  o alinhamento antiparalelo efetivamente blindam o spin da impureza, o sistema se encontra no regime de forte acoplamento e o estado fundamental é um singlete com spin total zero. Se  $J > 0$ , o acoplamento é ferromagnético (FM) e os elétrons de condução alinham seu spin com o da impureza, preservando o momento magnético. Tanto  $J < 0$  em temperaturas maiores que  $T_K$  como  $J > 0$  estão no regime de fraco acoplamento, e podem ser tratados com teoria da perturbação.

Como já mencionamos, por ter apenas um mecanismo de interação entre a impureza magnética e os elétrons de condução, o modelo de Kondo tradicional é compreendido como Modelo de Kondo de um canal.

### 3.3 Modelo de Anderson

Também representa um átomo incrustado em um metal não magnético (impureza e banda de condução). Mas agora o átomo pode perder ou ganhar elétrons para a banda de condução (14), de forma que a impureza pode ter quatro estados quânticos: a valência da impureza não é fixa, e dependendo dela a impureza pode ter spin não nulo. A figura 6 representa o modelo de Anderson: assim como no Modelo de Kondo, o metal não magnético é representado por uma banda de condução com largura  $2D$  semi-preenchida e isotrópica, com o zero centrado no nível de Fermi. Os elétrons de condução têm energia  $\epsilon_K$ , momentum  $\vec{k}$  e spin  $\sigma = \pm 1/2$ .

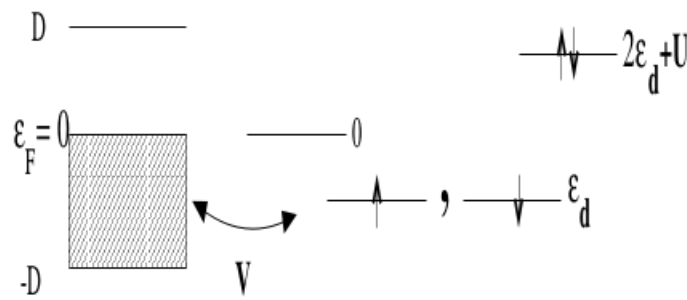


Figura 6 – Modelo de Anderson. A banda de condução é semi-preenchida e isotrópica, centrada no nível de Fermi. A impureza interage com o meio apenas através do seu orbital de valência, representado por quatro estados quânticos: com nenhum elétron e energia zero, com um elétron com spin para cima e energia  $\epsilon_d$ , com um elétron com spin para baixo e energia  $\epsilon_d$ , com dois elétrons antiparalelos e energia  $2\epsilon_d + U$ . Retirado da referência (28).

A impureza é representada por um orbital com energia  $\epsilon_d$ , podendo ganhar ou perder elétrons para a banda de condução. No orbital existem quatro estados quânticos e três configurações de energia de acordo com o número de elétrons na impureza (0, 1 ou 2): i) estado vazio com energia total  $E_0 = 0$ ; ii) estado unicamente ocupado por um elétron com spin  $\sigma$  e com energia total  $E_{1,\sigma} = \epsilon_d$ , onde  $\sigma = \pm 1/2$ ; iii) estado duplamente ocupado com elétrons com spin para cima e para baixo, com energia total  $E_2 = 2\epsilon_d + U$ , sendo  $U$  a repulsão Coulombiana  $U$  entre os elétrons. Os estados unicamente ocupados, por possuírem o mesmo nível de energia, são degenerados. Ambos apresentam momento magnético não nulo que contribui para a suscetibilidade magnética do sistema na forma da lei de Curie. Os outros dois estados (vazio e duplamente ocupado) não possuem momento magnético. As condições para que a impureza se comporte como um momento magnético

local são duas: i) que o estado unicamente ocupado tenha energia abaixo da energia de Fermi ( $\epsilon_d < \epsilon_F$ ) e ii) que adicionar um segundo elétron aumente demais a energia ( $2\epsilon_d + U > \epsilon_F$ ). Assim o estado da impureza com apenas um elétron é o estado mais favorável.

Em linguagem de segunda quantização, o Hamiltoniano de Anderson é dado por:

$$H = \sum_{k,\sigma} \epsilon_k c_{k,\sigma}^\dagger c_{k,\sigma} + \epsilon_d \sum_{\sigma} c_{d,\sigma}^\dagger c_{d,\sigma} + U c_{d,\uparrow}^\dagger c_{d,\uparrow} c_{d,\downarrow}^\dagger c_{d,\downarrow} + \sum_{k,\sigma} V (c_{k,\sigma}^\dagger c_{d,\sigma} + c_{d,\sigma}^\dagger c_{k,\sigma}), \quad (3.2)$$

sendo  $c_{d,\sigma}^\dagger$  um operador que cria um elétron na impureza com energia  $\epsilon_d$  e spin  $\sigma = \pm 1/2$ ,  $c_{k,\sigma,\alpha}^\dagger$  um operador que cria um elétron na banda de condução com energia  $\epsilon_k$  e spin  $\sigma = \pm 1/2$ . Os respectivos operadores sem o símbolo  $\dagger$  destroem as partículas. O parâmetro  $V$  é o elemento de matriz de hibridização entre os estados, isto é, representa a intensidade do processo da impureza perder ou ganhar um elétron para a banda de condução. É equivalente ao parâmetro  $J$  no modelo Kondo.

Enquanto no modelo Kondo a impureza é apenas um alvo que provoca espalhamento nos elétrons de condução, no modelo de Anderson a impureza perde ou ganha elétrons da banda de condução. Assim, a impureza no estado unicamente ocupado, pode perder um elétron com spin para cima e ganhar da banda um elétron com spin para baixo. Desta forma, ocorre efeito equivalente ao espalhamento no modelo Kondo: o spin da impureza muda com a interação com os elétrons de condução (ver figura 7).

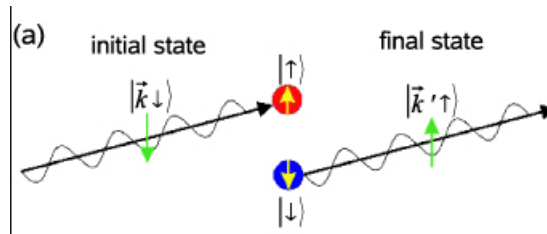


Figura 7 – Inversão do spin da impureza (29). No modelo Kondo a figura representa o processo de espalhamento dos elétrons de condução pela impureza magnética. No modelo de Anderson a figura representa a impureza cedendo e recebendo elétrons da banda de condução com spins diferentes. O efeito final é o mesmo: durante a interação a impureza tem o seu spin invertido.

Assim como no modelo Kondo tradicional, por ter apenas um mecanismo de interação entre a impureza magnética e os elétrons de condução, o modelo de Anderson tradicional é compreendido como modelo de Anderson de um canal.

### 3.4 Modelo de Anderson de Dois Canais - MADC

O Modelo de Anderson de Dois Canais representa um átomo que interage com os elétrons de uma banda de condução de um metal não magnético. Ao contrário dos modelos

anteriores, este modelo pretende ser mais realista e capaz de representar ligas metálicas e novos materiais.

Em 1980 Ph. Nozieres e A. Blandin argumentaram que os modelos de Kondo e de Anderson tradicionais desconsideram a estrutura orbital da impureza, assumindo que a mesma possui apenas grau de liberdade de spin (24). Isto é, mesmo que a impureza seja um elemento químico de transição ou terra-rara, com orbitais de valência do tipo  $d$  ou  $f$ , assume-se que o orbital tem simetria esférica (número quântico secundário  $l = 0$ ). Além disso, estes modelos também desconsideram interações devido ao campo cristalino e interação spin-órbita. Ligas metálicas e novos materiais requerem um modelo com mais graus de liberdade (30), e devem permitir o comportamento não-líquido de Fermi (31), que explicaremos adiante.

Os mesmos autores reconhecem que estes acréscimos nos modelos realísticos inviabilizam a resolução analítica dos respectivos Hamiltonianos. Por isso, eles propuseram a ideia de representar estas interações como um novo número quântico, denominado de *canal* (24). Nozieres e Blandin implementaram este conceito no Modelo de Kondo, criando o Modelo de Kondo multicanal.

Usando estes conceitos, D. L. Cox propôs generalizações para o Modelo de Anderson (23, 25). Uma possível generalização, em comunicação particular, foi apresentada por este pesquisador ao Prof. Dr. J. V. B Ferreira. Trata-se do *Modelo de Anderson de Dois Canais (MADC)* (32, 33).

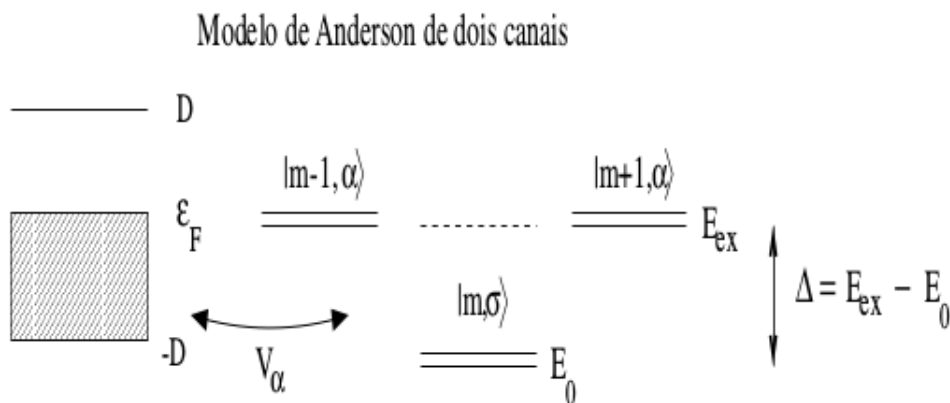


Figura 8 – Modelo de Anderson de Dois Canais. A banda de condução é semi-preenchida centrada no nível de Fermi. A impureza apresenta seis estados quânticos possíveis: dois estados com  $m$  elétrons e energia  $E_0$ , diferindo apenas no spin  $\sigma = \pm 1/2$ ; quatro estados com energia  $E_{ex} = E_0 + \Delta$  ( $\Delta > 0$ ), spin nulo e estado de canal  $\alpha = 1$  ou  $2$ , sendo dois com  $m - 1$  elétrons e dois com  $m + 1$  elétrons. Retirado da referência (28).

A figura 8 representa o MADC: o metal não magnético é representado por uma banda de condução com largura  $2D$  (assume-se  $D \approx 5eV$ ) semi-preenchida e com o zero

centrado no nível de Fermi. Os elétrons de condução têm energia  $\epsilon_k$ , momentum  $\vec{k}$ , spin  $\sigma = \pm 1/2$  e estado de canal  $\alpha = 1$  ou  $2$ . Isto significa que o efeito resultante de interações como campo cristalino, spin-órbita, etc, puderam ser reunidos em uma nova propriedade para o elétron, denominada de canal e que pode assumir dois valores. Outro modo de interpretar é assumir que dentro da banda existem *dois tipos* de elétrons de condução. É importante frisar que o conceito de canal é um mecanismo do tipo de ressonância em energia: não existe no espaço real  $xyz$  uma trajetória que defina o canal 1 ou 2.

A impureza é modelada por dois níveis de energia degenerados. O nível de mais baixa energia tem valor  $E_0$  e corresponde a dois estados quânticos, cada um deles com  $m$  elétrons e diferindo apenas no spin  $\sigma = \pm 1/2$ . O nível de energia mais alta tem valor  $E_{ex} = E_0 + \Delta$  ( $\Delta > 0$ ) e corresponde a quatro estados quânticos, cada um deles com spin nulo e estado de canal  $\alpha = 1$  ou  $2$ . Destes quatro, dois estados tem  $m - 1$  elétrons e dois com  $m + 1$  elétrons.

Portanto somente os dois estados quânticos com energia mais baixa têm momento magnético. Seguindo a prescrição de Nozieres, a impureza no estado fundamental pode interagir com a banda de condução via dois mecanismos de ressonância em energia, denominados canais e descritos pelo número quântico  $\alpha$  ( $\alpha = 1$  ou  $2$ ), cada um com seu próprio acoplamento  $V_\alpha$ . Após essa interação, a impureza ganhará ou perderá um elétron, de forma que seu spin passa a ser nulo e o estado passa a ser não magnético. O processo inverso é permitido.

No MADC, ao contrário do Modelo de Anderson tradicional, existe um acoplamento antiferromagnético para cada canal,  $V_1$  ou  $V_2$ . Se os acoplamentos são iguais ( $V_1 = V_2$ ), os autovalores de energia possuem espectro diferente daquele caracterizado pelo comportamento líquido de Fermi, chamado comportamento não-líquido de Fermi. Na seção 3.7 comentaremos estes conceitos.

Em linguagem de segunda quantização, o MADC tem o seguinte Hamiltoniano:

$$H = H_{cb} + H_{imp} + H_{hyb}. \quad (3.3)$$

$$H_{cb} = \sum_{k,\sigma,\alpha} \epsilon_k c_{k\sigma\alpha}^\dagger c_{k\sigma\alpha}, \quad (3.4)$$

$$\begin{aligned} H_{imp} = & E_0 \sum_{\sigma} |m, \sigma\rangle \langle m, \sigma| \\ & + (E_0 + \Delta) \sum_{\alpha} |m - 1, \alpha\rangle \langle m - 1, \alpha| \\ & + (E_0 + \Delta) \sum_{\alpha} |m + 1, \alpha\rangle \langle m + 1, \alpha|, \end{aligned} \quad (3.5)$$

$$H_{hyb} = \sum_{k,\sigma,\alpha} V_\alpha (f_{-1,\sigma,\alpha}^\dagger c_{k\sigma\alpha} + h.c.) . \quad (3.6)$$

$H_{bc}$ ,  $H_{imp}$  e  $H_{hyb}$  representam a banda de condução, a impureza magnética e o acoplamento banda-impureza, respectivamente.  $c_{k\sigma\alpha}^\dagger$  criam um elétron livre de condução com momento  $\vec{k}$ , spin  $\sigma = \pm 1/2$ , canal  $\alpha = 1$  or  $2$  e energia  $\varepsilon_k$ . O operador  $f_{-1,\sigma,\alpha}^\dagger$  é definido de tal maneira que representa a transição do estado fundamental para o estado excitado e vice-versa, e mantenha a simetria de spin e canal nos estados quânticos:  $f_{-1,\sigma,\alpha}^\dagger = |m, \sigma\rangle \langle m-1, -\alpha| + (2\sigma) |m+1, \alpha\rangle \langle m, -\sigma|$  ( $\alpha = -1 \rightarrow \alpha = 2$  e  $\alpha = -2 \rightarrow \alpha = 1$ ).

Os parâmetros  $\Delta$ ,  $V_1$  e  $V_2$  definem o comportamento do sistema físico representado pelo MADC. Quando  $V_1 = V_2 = 0$  a impureza está isolada dos elétrons de condução e não ocorre efeito Kondo. Quando  $V_1 \neq V_2$  o canal com acoplamento mais forte prevalece e o efeito Kondo ocorre blindando completamente o spin da impureza. A partir daí ( $T < T_K$ ) o sistema se comporta como descrito pela Teoria do Líquido de Fermi. Quando  $V_1 = V_2$  nenhum canal prevalece, ocorre efeito Kondo, mas a ação conjunta dos canais sempre resulta em momento magnético não nulo. O sistema físico se comporta de maneira diferente do caso anterior e este comportamento recebe a denominação de não-líquido de Fermi.

### 3.5 Transformação de Schrieffer-Wolff

A transformação de Schrieffer-Wolff (15) relaciona os Hamiltonianos dos modelos de Anderson e Kondo. Ao remover as excitações de altas energias do modelo de Anderson, foi demonstrado que o Hamiltoniano torna-se equivalente ao do modelo de Kondo. Em outras palavras, o modelo de Kondo está no regime de forte acoplamento do modelo de Anderson.

Como demonstrado na referência (8), também há uma equivalência entre o MADC e o modelo de Kondo de dois canais para baixas energias de excitação:

$$|J_\alpha| = \frac{8V_\alpha^2}{\Delta}, \quad (3.7)$$

onde  $J_\alpha < 0$  é o acoplamento antiferromagnético entre a impureza e os elétrons da banda de condução via canal  $\alpha$  no Modelo Kondo,  $V_\alpha$  é o parâmetro equivalente no Modelo de Anderson e  $\Delta$  é a diferença de energia entre o nível fundamental e o nível de energia excitado da impureza neste modelo.

### 3.6 Grupo de Renormalização Numérica - GRN

O GRN foi desenvolvido por Wilson (7) para o modelo de Kondo de um canal e posteriormente aplicado por Krishna-Murthy et al. para o modelo de Anderson de um canal

(9). Em suma, o GRN transforma o Hamiltoniano em uma série semi-infinita de termos com ordem decrescente de escalas de energia; somente o primeiro termo da série representa o acoplamento com a impureza. Os autoestados são construídos recursivamente, permitindo o truncamento dos estados baseados nas escalas de energia relevantes ao fenômeno, sem comprometer as propriedades físicas da impureza.

Temos então um método não perturbativo pelo qual o espectro de energia do modelo é obtido. As propriedades físicas são calculadas usando o GRN com os métodos intercalação (34, 35) e multipassos (36), implementadas no código computacional utilizado.

### 3.7 Teoria do Líquido de Fermi

Não há uma solução geral para os problemas de muitos corpos na física. No entanto, existem diversas aproximações que explicam com variado grau de sucesso casos específicos de interação da matéria. Um desses casos é a teoria do Líquido de Fermi, uma aproximação para um problema de muitos corpos envolvendo férmions, elaborada por Lev Davidovich Landau em 1956 (37). Originalmente proposta para explicar o comportamento de  $^3\text{He}$  em baixas temperaturas, tão logo percebeu-se que uma abordagem similar poderia ser estendida para uma variedade de sistemas fermiônicos, dentre eles os elétrons de condução de um metal. A ideia de Landau foi partir de um sistema de férmions não interagentes, como no gás de Fermi, e ligar as interações entre as partículas gradativamente, como em um processo adiabático. Tal abordagem foi utilizada por Nozières (38) para explicar as propriedades de baixas temperaturas em metais com impurezas magnéticas, possibilitando o cálculo de propriedades de equilíbrio: calor específico e susceptibilidade magnética e propriedades de transporte: resistividade elétrica e condutividade elétrica.

Resumidamente, um sistema físico que se comporta como Líquido de Fermi tem as seguintes características em temperatura muito baixa ( $T \rightarrow 0$ ):

- i) o calor específico eletrônico é linear com a temperatura ( $C \propto T$ );
- ii) a suscetibilidade magnética tende a um valor constante ( $\chi \propto \text{cte}$ ) e
- iii) a resistividade elétrica depende de  $T^2$  mas tem o seu mínimo não nulo para  $T = 0$ .

### 3.8 Teoria do não Líquido de Fermi

A descoberta de uma nova classe de materiais (39), os férmions pesados, mostrou que a suposição básica da teoria do Líquido de Fermi de que em baixas temperaturas os elétrons de um metal se comportam como um coletivo de partículas fracamente interagentes era violada. Esses materiais, exibem um comportamento não usual em suas propriedades

de baixas temperaturas, se comparados com sistemas com comportamento de um Líquido de Fermi. Logo, convencionou-se denominar seu comportamento não usual de não líquidos de Fermi.

Historicamente foram as medições experimentais do calor específico, susceptibilidade magnética e resistividade elétrica do sistema  $Y_{1-x}U_xPd_3$  (25) que geraram interesse nos modelos de Kondo de vários canais, desenvolvidos teoricamente na década anterior e que eram capazes de exibir esse comportamento não líquido de Fermi.

### 3.9 Susceptibilidade magnética

O grau de magnetização de um material em resposta a um campo magnético externo aplicado é proporcional a uma grandeza física adimensional, a susceptibilidade magnética. A relação é dada por:

$$M = \chi H, \quad (3.8)$$

onde  $M$  é a magnetização do material e  $H$  o campo externo aplicado.

A origem do magnetismo em materiais é consequência dos momentos magnéticos associados aos spins dos elétrons. Os elétrons nos átomos tendem a ocupar estados quânticos nos orbitais atômicos de acordo com as regras de Hund. Estes átomos interagem com outros átomos ao seu redor podendo formar momentos magnéticos locais. Conforme a resposta destes momentos magnéticos locais à presença de um campo magnético externo, os materiais podem ser classificados, entre as diversas formas de magnetismo, em ferromagnéticos e antiferromagnéticos.

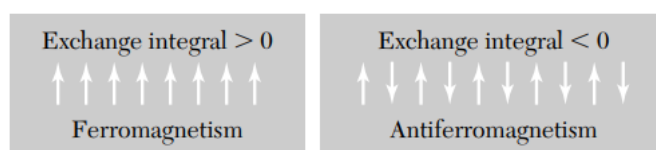


Figura 9 – Em um material ferromagnético, os momentos magnéticos tendem a se alinhar e a energia de troca  $J$  é positiva. No material antiferromagnético, os momentos magnéticos se alinham antiparalelamente e a energia de troca  $J$  é negativa. Retirado da referência (40).

Ferromagnéticos são os materiais metálicos que apresentam um momento magnético permanente na ausência de um campo externo, e se manifestam com a presença de magnetização permanente. Metais de transição como o Fe, Co, Ni e terras raras como o Gd são ferromagnéticos. Os spins dos elétrons estão alinhados, com mesma direção e sentido.

Ao contrário do ferromagnetismo, no antiferromagnetismo existe uma tendência dos átomos e íons a se alinharem antiparalelamente, quando estes estão abaixo da temperatura



de Néel ( $T_N$ ). Acima de  $T_N$ , o material se torna paramagnético, pois a energia térmica se torna grande o suficiente para desordenar os momentos magnéticos. O antiferromagnetismo é encontrado em compostos de metais de transição, tais como óxidos: MnO, CoO, NiO, FeO, no metal Cr e em ligas de FeMn.

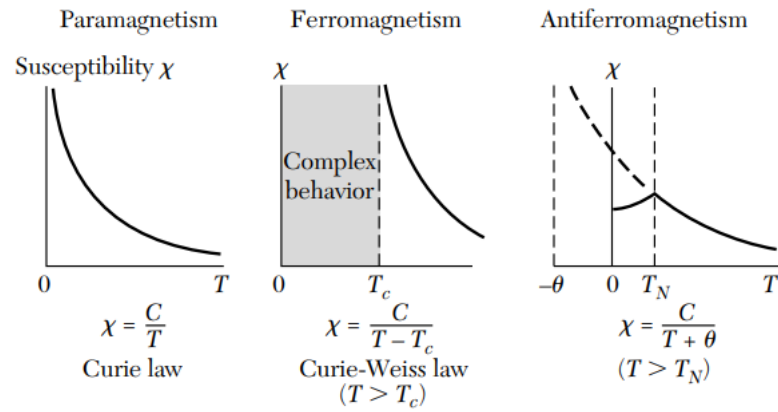


Figura 10 – A susceptibilidade magnética  $\chi$  em função da temperatura  $T$  para os casos de paramagnetismo, ferromagnetismo e antiferromagnetismo. No antiferromagnetismo a susceptibilidade magnética é máxima em  $T_N$  e diminui com o aumento da temperatura.

Fonte: KITTEL, C. Introduction to Solid State Physics. 8ª edição. New York: Wiley, 2005.

Na região paramagnética, a lei de Curie-Weiss é expressa por

$$\chi = \frac{2C}{T + T_N}. \quad (3.9)$$

Experimentalmente a temperatura de Néel é substituída pela temperatura de Weiss  $\theta$  (estas diferem pela razão de  $T_N$  utilizar a teoria de campo médio (40)):

$$\chi = \frac{2C}{T + \theta}. \quad (3.10)$$

A susceptibilidade magnética da impureza para o efeito Kondo foi calculada por Wilson (7), que verificou que a curva se ajusta bem a uma lei de Curie-Weiss, substituindo  $\theta$  por  $T_K$ .

Neste trabalho o interesse está no caso de uma interação antiferromagnética.

### 3.10 Temperatura Kondo

A temperatura Kondo  $T_K$  pode ser definida em termos de diversas grandezas físicas, dentre elas a susceptibilidade magnética da impureza. Ishii e Yosida (41) calcularam a susceptibilidade magnética a zero Kelvin de um spin antiferromagnético localizado

acoplado com elétrons de condução, assumindo que um estado singleto é formado entre o spin localizado e os elétrons de condução. A expressão matemática obtida pode ser escrita em função de  $T_K$  no modelo de Kondo de um canal, e é dada por

$$T_K = \frac{1}{4\chi_0}, \quad (3.11)$$

onde  $\chi_0 \equiv \lim_{T \rightarrow 0} \chi(T)$  é a susceptibilidade magnética da impureza no limite de temperatura tendendo a zero.

Cálculos posteriores realizados por Wilson (7) por meio de teoria da perturbação em segunda ordem no Hamiltoniano de Kondo e por resultados numéricos do GRN mostraram que a susceptibilidade magnética pode ser dividida em várias expressões, cada uma válida em um dado intervalo de temperatura. Verificou-se que os resultados se ajustam bem em uma expressão como a Lei de Curie-Weiss

$$\chi = \frac{C}{T + \theta}. \quad (3.12)$$

$T$  é a temperatura,  $\theta$  e  $C$  são constantes.

A Lei de Curie-Weiss adaptada para o intervalo de temperatura próximo a  $T_K$  ( $0,5 T_K < T < 16 T_K$ ) é

$$\chi(T) = \frac{0,68(g\mu_B)^2}{4k_B(T + \sqrt{2}T_K)}, \quad (3.13)$$

sendo  $k_B$  é a constante de Boltzmann,  $g$  o fator giromagnético do elétron e  $\mu_B$  é o magneton de Bohr. No caso de  $T = T_K$ ,  $T\chi = 0,07$ . Dessa forma é possível determinar  $T_K$  por um método gráfico-numérico, a ser descrito neste capítulo. É importante notar que no artigo original (7) e em posteriores (9), tanto de Wilson como Krishna-murthy et al, 3.13 apresenta um erro de tipografia ( $2T_K$  ao invés de  $\sqrt{2}T_K$ ), fato observado e corrigido por Tsvetick e Wiegmann (42). A equação 3.13 pode ser usada no modelo de Anderson com boa aproximação (9).

Os diversos valores da temperatura  $T_K$  deste trabalho foram calculados da seguinte maneira: Primeiramente o hamiltoniano do MADC é diagonalizado por meio do GRN e com os autovalores obtidos, calculou-se a susceptibilidade magnética, dada por

$$\frac{k_B T \chi}{(g\mu_B)^2} = \langle S_z^2 \rangle - \langle S_z \rangle^2, \quad (3.14)$$

sendo  $\langle S_z \rangle$  o valor médio do componente  $z$  do spin, calculado usando função de partição. Posteriormente, busca-se o valor da temperatura que satisfaça  $k_B T_K \chi / (g\mu_B)^2 = 0,07$ , conseguido por uma simples interpolação linear com os dados calculados pela equação 3.14. A justificativa desse método gráfico-numérico está no fato do gráfico de  $k_B T_K \chi / (g\mu_B)^2$

em função de  $T/T_K$  apresentar o comportamento universal da susceptibilidade, ou seja, as várias curvas obtidas para diversos valores de  $V_1$ ,  $V_2$  e  $\Delta$  apresentam o mesmo comportamento em baixas temperaturas, inclusive quando  $T$  é igual a  $T_K$ . A universalidade também é preservada no MADC, embora as curvas para acoplamentos iguais (43) ( $V_1 = V_2$ ), o chamado comportamento não líquido de Fermi, sejam distintas do caso em que os acoplamentos são diferentes ( $V_1 \neq V_2$ ), conhecido como comportamento líquido de Fermi.

A susceptibilidade magnética do modelo de Anderson pode ser dividida em três regiões. Regime orbital-livre:  $T \cdot \chi \rightarrow 1/8$ . Em altas temperaturas, o acoplamento banda-impureza pode ser desconsiderado. Regime fortemente acoplado ou regime Kondo:  $T \cdot \chi \rightarrow 0$ . Ocorre para temperaturas muito menores que  $T_K$ . A impureza tem o seu spin blindado pelos elétrons de condução. Regime de momento local:  $T \cdot \chi \rightarrow 1/4$ . Entre os regimes orbital-livre e o fortemente acoplado pode existir essa região, que assintoticamente tende a  $1/4$ , como no modelo de Kondo.

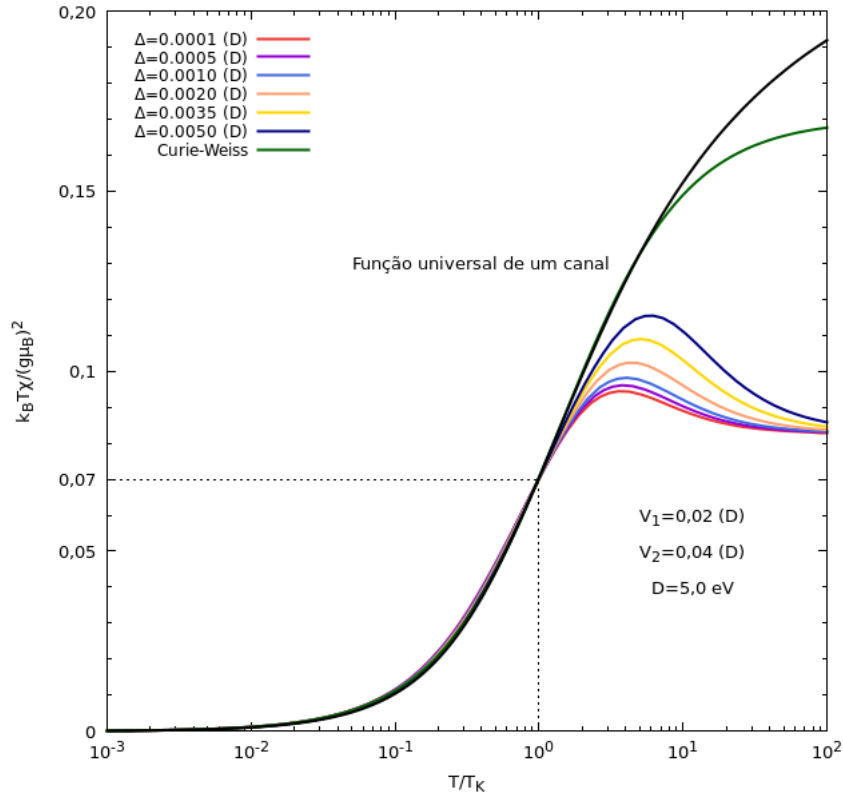


Figura 11 – Susceptibilidade magnética vezes a temperatura, escalada com as constantes descritas no eixo vertical. O eixo horizontal é a temperatura  $T$  dividida pela temperatura Kondo  $T_K$  para cada curva. Os pontilhados correspondem a  $T = T_K$ . A linha preta é a curva universal do modelo de Kondo de um canal, obtida por Wilson. A linha verde é a Lei de Curie-Weiss. Os parâmetros do MADC,  $V_1$  e  $V_2$  foram mantidos constantes e  $\Delta$  foi variado. Em baixas temperaturas  $T \cdot \chi$  apresenta comportamento universal, até mesmo no MADC.

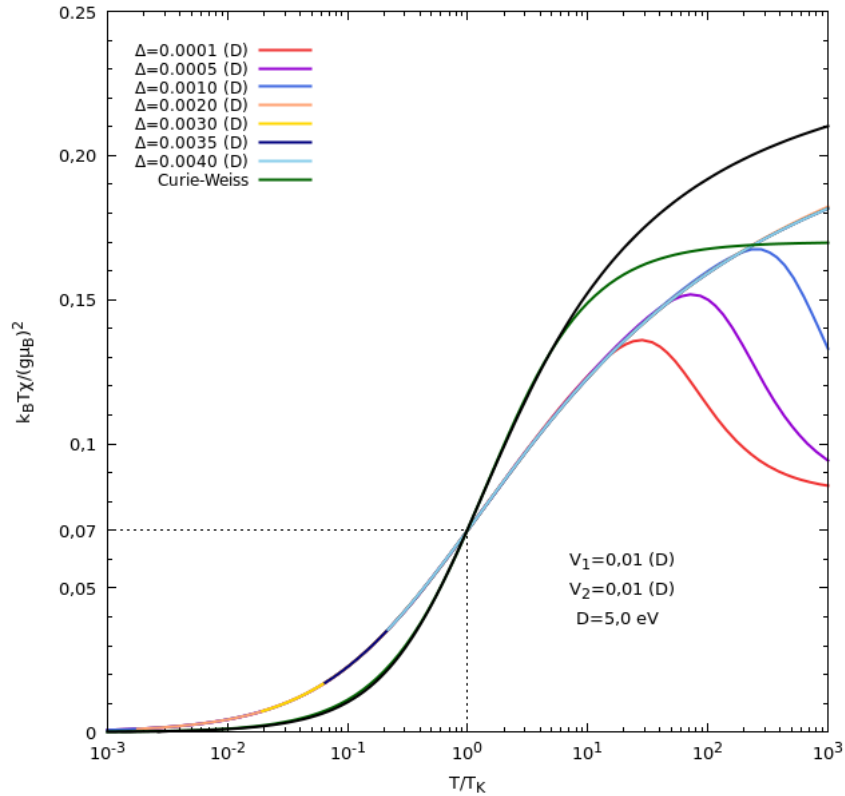


Figura 12 – Susceptibilidade magnética vezes a temperatura, escalada com as constantes descritas no eixo vertical, para o regime não líquido de Fermi (para mais detalhes, veja a referência (43)). Os parâmetros do MADC,  $V_1$  e  $V_2$  foram mantidos constantes e  $\Delta$  foi variado. Em baixas temperaturas  $T \cdot \chi$  apresenta comportamento universal, embora os resultados do MADC sejam diferentes do modelo de Kondo.

## 4 Resultados e Discussão

Nós apresentamos os resultados numéricos obtidos do MADC para vários conjuntos de parâmetros  $\Delta$ ,  $V_1$  e  $V_2$ :  $\Delta$  corresponde à diferença entre o estado fundamental e o excitado,  $V_1$  e  $V_2$  são os acoplamentos antiferromagnéticos da impureza para cada canal. Os três parâmetros foram definidos em unidades de  $D$ , a largura da banda de condução. Neste trabalho adotamos  $D = 5$  eV, que é próximo aos valores experimentais para metais como o ouro e a prata (44).

Com o intuito de obter a temperatura Kondo, adotamos o seguinte procedimento: para um dado conjunto de  $\Delta$ ,  $V_1$  e  $V_2$ , o Hamiltoniano do MADC é diagonalizado usando o GRN. A susceptibilidade magnética em função da temperatura é calculada e  $T_K$  é determinado pelo método de Krishna-murthy et al.:  $T\chi = 0,07$ . As barras de erro apresentadas nos gráficos desta seção e demais subseções são uma estimativa do erro ao se fazer uma interpolação linear para determinar  $T\chi = 0,07$ , ficando entre 3% e 4%.

O código computacional utilizado para a obtenção dos resultados numéricos do MADC foi implementado pelo Prof. Dr. João Vítor Batista Ferreira, em linguagem C++, desenvolvido em sua tese de doutorado. Para cada valor de  $V_1$ ,  $V_2$  e  $\Delta$ , há um custo computacional envolvido para a determinação de  $T_K$ . Em um notebook com processador Intel Core i5 de quinta geração, cada cálculo requer entre seis e oito horas.

A geração dos gráficos apresentados foi realizada no software gratuito Gnuplot, para sistema operacional Linux. Por se tratar de software em língua inglesa, o separador decimal é o ponto (.) ao invés da vírgula (,). Dadas as dificuldades técnicas, a notação inglesa foi mantida nos gráficos, no entanto nos demais textos o padrão do separador decimal com vírgula foi utilizado.

A dependência de  $T_K$  em função de  $V_1$ ,  $V_2$  e  $\Delta$  é mostrada na figura 13. Para um dado valor de  $V_1$  (ou  $V_2$ ),  $T_K$  é menor no regime não-líquido ( $V_1 = V_2$ ) do que no líquido de Fermi. Além disso,  $T_K$  é completamente simétrico em relação ao eixo diagonal. Para um  $\Delta$  maior, menor é  $T_K$ . Apresentamos gráficos com dois dos três parâmetros fixos, a fim de uma melhor análise.

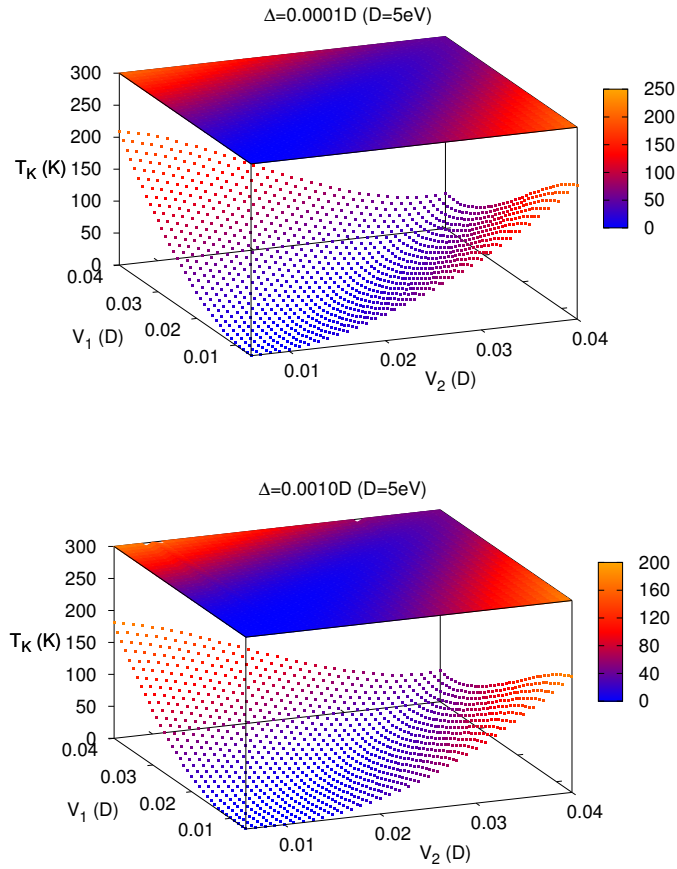


Figura 13 –  $T_K$  como função dos vários valores de  $V_1$  e  $V_2$  no MADC, cada um com diferente  $\Delta$ .  $D$  é a meia largura da banda de condução ( $D = 5$  eV). A temperatura Kondo diminui se  $V_1$  e  $V_2$  são iguais:  $V_1 = V_2$  resultam no regime não-líquido de Fermi. Todos os pontos foram obtidos diagonalizando a equação 3.11 com o GRN.

A figura 14 exhibe as temperaturas  $T_K$  quando os planos verticais interceptam os dois eixos da figura 13. Um plano é devido à restrição  $V_1 = 0$ : a impureza interage com a banda de condução pelo canal  $\alpha = 2$ . Isso faz com que o MADC se comporte como o modelo de Anderson de um canal, exibindo comportamento de líquido de Fermi. Outro plano é a restrição  $V_1 = 0,04$  ( $D$ ): a impureza interage com a banda de condução pelos dois canais. Enquanto que pelo canal  $\alpha = 1$  o acoplamento é constante, no canal  $\alpha = 2$  o fator de acoplamento varia de zero até  $V_1$  ( $0 \leq V_2 \leq V_1$ ). As duas curvas desse caso correspondem ao sistema físico representado pelo MADC indo por uma transição de comportamento: do líquido de Fermi para o não-líquido de Fermi. Por último, o terceiro plano é a restrição  $V_1 = V_2$  para qualquer valor de  $V_2$ . Nesse caso o MADC está totalmente na fase não-líquida de Fermi.

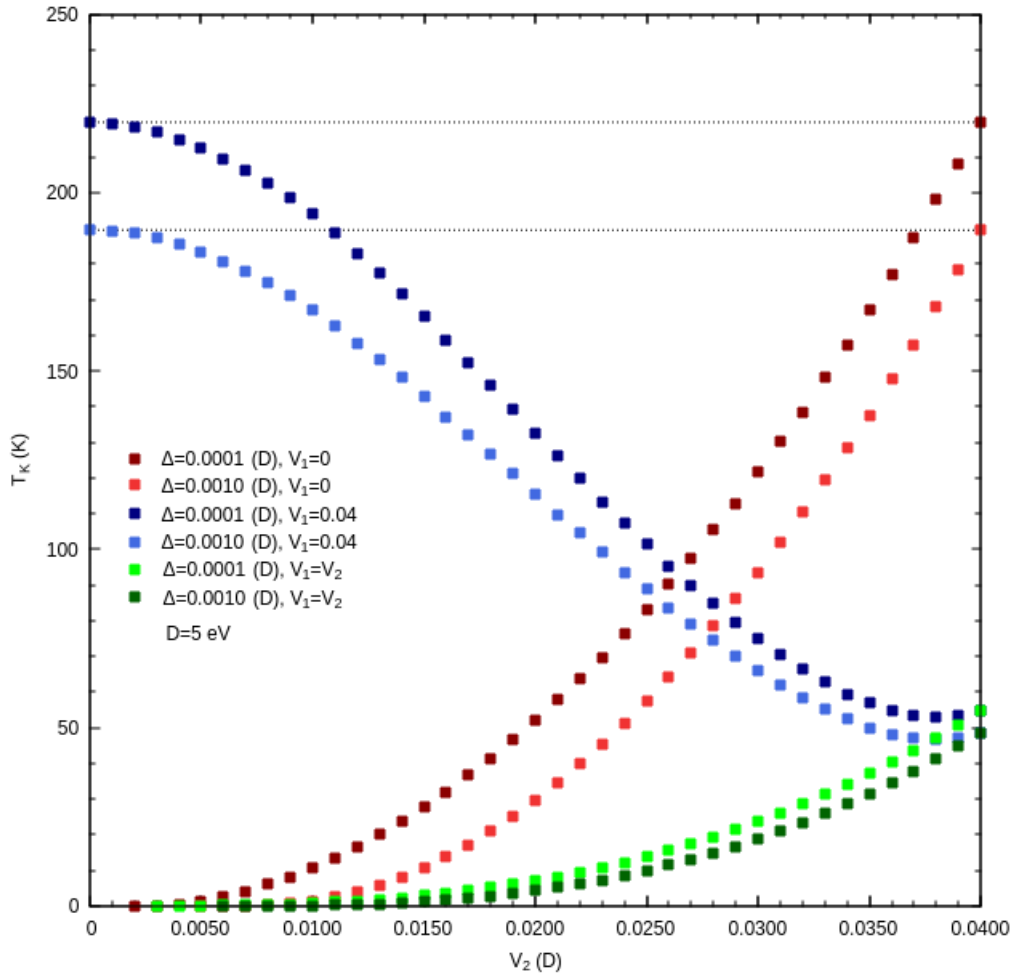


Figura 14 –  $T_K$  em função  $V_2$ , com diferentes  $\Delta$  e  $V_1$ . Esses pontos aparecem na figura 14 nos seguintes planos:  $V_1 = 0$ ,  $V_1 = 0,04$  e  $V_1 = V_2$ . As linhas pontilhadas são apresentadas com o intuito de destacar que  $T_K(V_1 = 0,04; V_2 = 0; \Delta)$  é igual a  $T_K(V_1 = 0; V_2 = 0,04; \Delta)$ .

No que tange aos ajustes de curva apresentados neste trabalho, estes foram calculados com o uso do software livre e de código aberto SageMath, em sua versão para a nuvem, denominada CoCalc. Inicialmente os ajustes eram realizados em programação Fortran, e posteriormente verificou-se que o CoCalc atendia muito melhor às necessidades específicas deste trabalho, com maior versatilidade na hora de escolher a função a ser ajustada com a biblioteca de mínimos quadrados que o software apresenta. Os ajustes são apresentados nas subseções a seguir.

#### 4.1 Impureza acoplada a só um canal ( $V_1 \neq 0$ e $V_2 = 0$ )

Quando um dos canais  $V_\alpha$  é zero, o MADC torna-se o modelo de um canal. Para o modelo de Kondo, a temperatura Kondo é definida (45) por

$$T_K \sim D \cdot \exp(-1/2J\rho), \quad (4.1)$$

onde  $D$  é a largura de banda,  $J$  é a interação de troca (acoplamento antiferromagnético) entre os spins da impureza e banda de condução e  $\rho$  é a densidade de estados da banda de condução. Trocando os parâmetros  $J$  e  $\rho$  por  $V$  e  $\Delta$  do modelo de Anderson ( $J \sim V_\alpha^2/\Delta$ , para mais veja a seção 3.5), temos

$$T_K = a_1 \cdot \exp(-a_2 \Delta/V_1^2). \quad (4.2)$$

Com a definição de  $T_K$  usual, foram realizadas tentativas de ajuste das temperaturas obtidas pelo GRN com a equação 4.2. As funções obtidas não foram capazes de descrever corretamente as temperaturas, embora a ordem de grandeza dê uma estimativa da escala de temperatura em que ocorre o efeito Kondo.

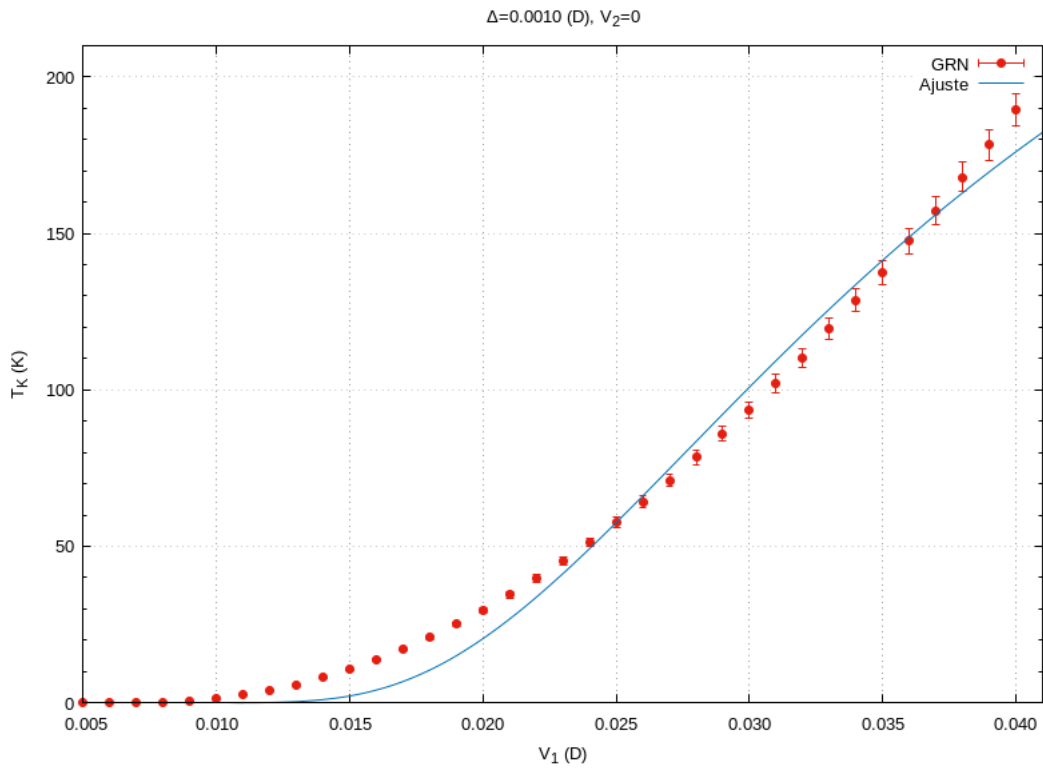


Figura 15 – Gráfico de  $T_K$  em função de  $V_1$ . Os dados obtidos pelo GRN foram ajustados à equação 4.2, resultando em  $T_K = 360,42 \cdot \exp(-1,15\Delta/V_1^2)$ .

Não obstante,  $T_K$  pode ser definido de forma mais precisa. Para o modelo de Kondo, há uma expansão (7) da expressão original (equação 4.2) utilizando teoria da perturbação, cujo resultado obtido é

$$T_k = \tilde{D} \cdot \exp(-1/|2J\rho| + 0,5 \ln |2J\rho| + 1,5824|2J\rho| + O(J^2\rho^2)). \quad (4.3)$$

$\tilde{D}$  é proporcional a largura de banda  $D$  do metal e depende de  $\rho J$ :  $\tilde{D}(J\rho) = D(c_0 + c_1 J\rho + c_2 J^2\rho^2 + \dots)$ . O próprio autor da expansão analisou  $\tilde{D}$ , o expandiu até o termo de ordem



J e calculou as constantes, chegando à conclusão de que a expressão obtida contradiz resultados previamente obtidos. Já o termo  $1,5824|2J\rho|$ , concluiu-se que este não é muito útil (7), a não ser que  $\tilde{D}$  seja expandido até o termo de ordem  $J\rho$ . Eliminando esse termo, temos outra maneira de calcular  $T_K$ :

$$T_k = D \cdot \exp(-1/|2J\rho| + 0,5 \ln |2J\rho|). \quad (4.4)$$

Convém notar que a equação 4.4 não é válida para qualquer intervalo, pois é um resultado da teoria da perturbação. No modelo de Kondo, a sua validade é para  $\rho J \ll 1$ . Partindo de uma equação semelhante a 4.4, com as constantes a serem determinadas:

$$T_k = a_1 \cdot \exp(-a_2/J + a_3 \ln J), \quad (4.5)$$

e trocando J por V:

$$T_k = b_1 \cdot \exp(-b_2\Delta/V_1^2 + b_3 \ln(V_1^2/\Delta)). \quad (4.6)$$

Essa equação se ajusta aos diversos valores de  $T_K$  calculados pelo GRN, rendendo constantes diferentes para cada V e  $\Delta$  adotado. A dificuldade está em conseguir um ajuste mais geral, que com uma única equação retorne  $T_K$  para vários valores de V e  $\Delta$ .

Em um ajuste livre, com as constantes  $b_1$ ,  $b_2$  e  $b_3$ , foram obtidos:

$$T_K(V_1, V_2 = 0, \Delta = 0,0010) = 134,11 \cdot \exp(-0,22\Delta/V_1^2 + 1,03 \ln V_1^2/\Delta);$$

$$T_K(V_1, V_2 = 0, \Delta = 0,0020) = 265,97 \cdot \exp(-0,21\Delta/V_1^2 + 1,07 \ln V_1^2/\Delta);$$

$$T_K(V_1, V_2 = 0, \Delta = 0,0035) = 468,95 \cdot \exp(-0,20\Delta/V_1^2 + 1,10 \ln V_1^2/\Delta);$$

$$T_K(V_1, V_2 = 0, \Delta = 0,0050) = 660,61 \cdot \exp(-0,21\Delta/V_1^2 + 1,07 \ln V_1^2/\Delta).$$

Observou-se que as constantes  $b_2$  e  $b_3$  variaram pouco. Na busca por uma consistência no ajuste, fixou-se  $b_2 = 0,21$  e  $b_3 = 1,07$  e obteve-se:

$$T_K(V_1, V_2 = 0, \Delta = 0,0010) = 131,56 \cdot \exp(-0,21\Delta/V_1^2 + 1,07 \ln V_1^2/\Delta);$$

$$T_K(V_1, V_2 = 0, \Delta = 0,0020) = 266,32 \cdot \exp(-0,21\Delta/V_1^2 + 1,07 \ln V_1^2/\Delta);$$

$$T_K(V_1, V_2 = 0, \Delta = 0,0035) = 466,49 \cdot \exp(-0,21\Delta/V_1^2 + 1,10 \ln V_1^2/\Delta);$$

$$T_K(V_1, V_2 = 0, \Delta = 0,0050) = 666,48 \cdot \exp(-0,21\Delta/V_1^2 + 1,07 \ln V_1^2/\Delta).$$

A relação entre  $b_1$  e  $\Delta$  obtida foi linear:  $b_1 = 133237,73 \cdot \Delta$ . Dessa forma, a expressão para  $T_K(V_1, V_2 = 0, \Delta)$  foi:

$$T_K(V_1, V_2 = 0, \Delta) = 133237,73\Delta \cdot \exp(-0,21\Delta/V_1^2 + 1,07 \ln V_1^2/\Delta). \quad (4.7)$$

Os ajustes obtidos partindo-se da equação 4.6 e chegando a equação 4.7 são apresentados logo abaixo, na figura 16.

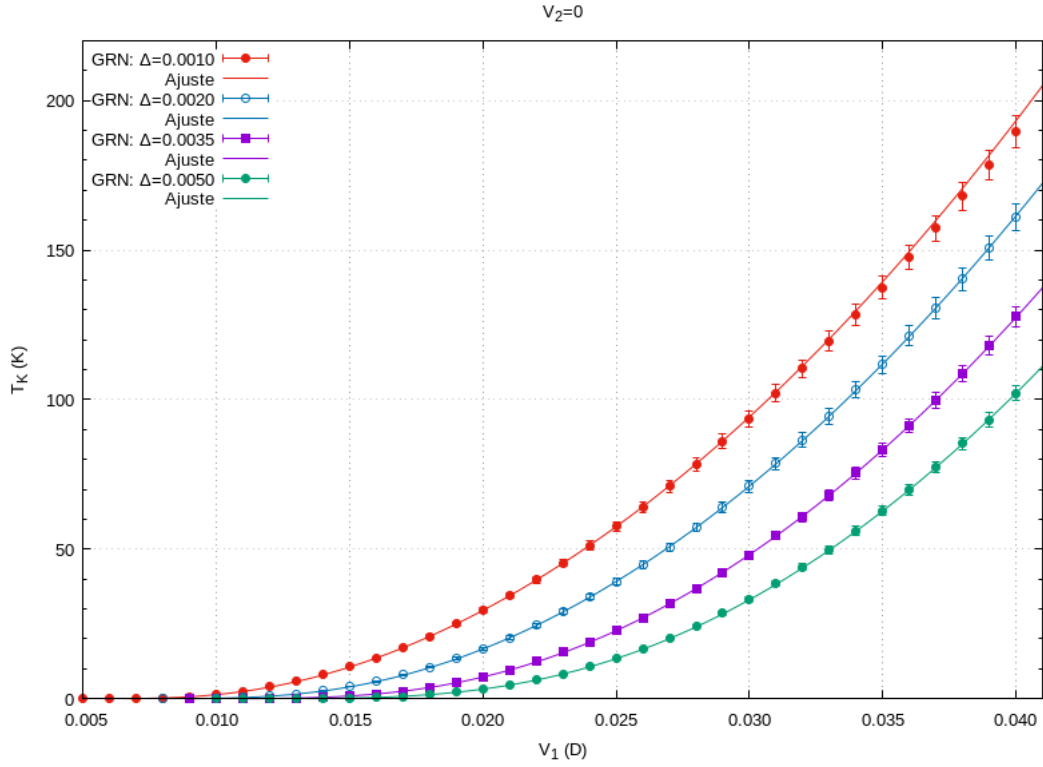


Figura 16 – Gráfico de  $T_K$  em função de  $V_1$ . As linhas são o ajuste obtido:  $T_K = 133237,73\Delta \cdot \exp(-0,21\Delta/V_1^2 + 1,07 \ln V_1^2/\Delta)$  e os círculos e quadrados com barra de erro são os valores de  $T_K$  calculados pelo GRN.

Verificou-se ainda, que o erro relativo entre o ajuste e o calculado pelo GRN ficou abaixo de 10% para os seguintes valores de  $V_1$ :

$$V_1 \geq 0,0080, \Delta = 0,0010;$$

$$V_1 \geq 0,0110, \Delta = 0,0020;$$

$$V_1 \geq 0,0140, \Delta = 0,0035;$$

$$V_1 \geq 0,0170, \Delta = 0,0050.$$

Desse modo, a equação 4.6 se mostrou adequada para o intervalo de  $V_1$  e diversos valores de  $\Delta$  considerados.

## 4.2 Impureza acoplada igualmente aos dois canais ( $V_1 = V_2$ )

O MADC prevê a possibilidade da impureza magnética estar igualmente acoplada aos dois canais. Para fins de simplificação de notação, adotou-se  $V_1 = V_2 = V$ . Após extensa revisão de literatura, não foi encontrada uma expressão de  $T_K$  para este caso, e como primeira tentativa de ajuste, foi usada a equação 4.2.

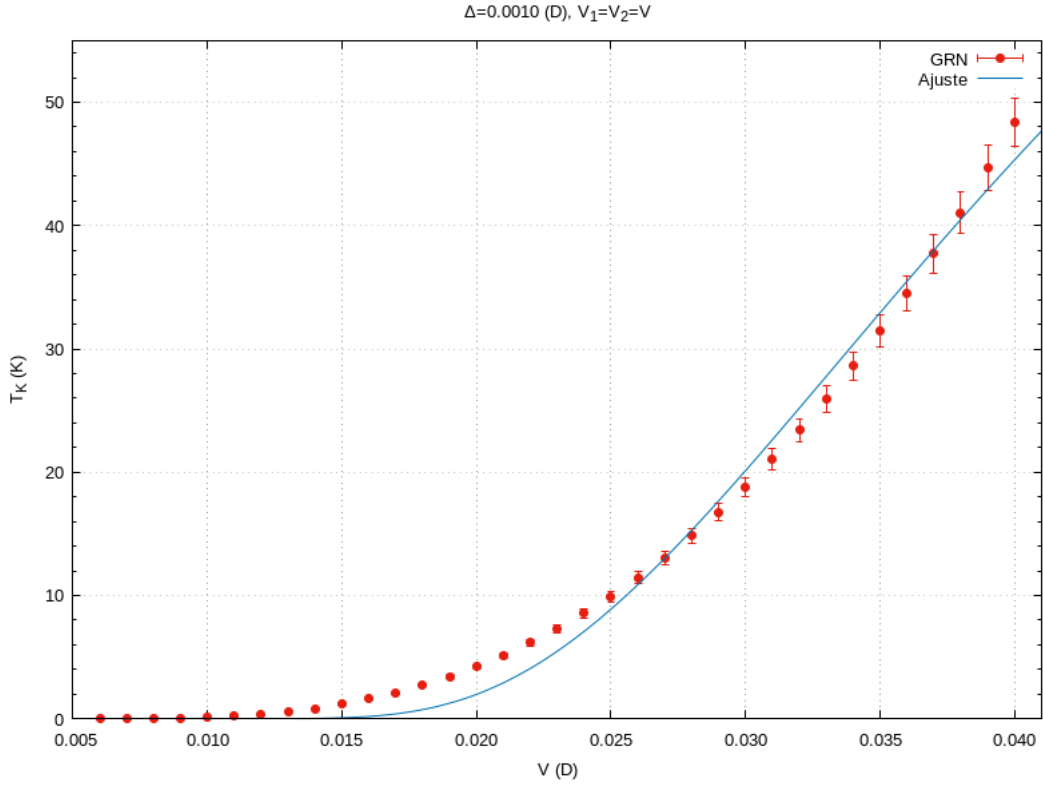


Figura 17 – Gráfico de  $T_K$  em função de  $V$ . Os dados obtidos pelo GRN foram ajustados à equação 4.2, resultando em  $T_K = 128,75 \cdot \exp(-1,67\Delta/V^2)$ .

Como no caso da impureza acoplada a um só canal, a equação 4.6 mostrou-se mais adequada ao ajuste.

Novamente, em um ajuste livre, com as constantes  $b_1$ ,  $b_2$  e  $b_3$ , foram obtidos:

$$T_K(V, \Delta = 0,0010) = 28,32 \cdot \exp(-0,23\Delta/V^2 + 1,45 \ln V^2/\Delta);$$

$$T_K(V, \Delta = 0,0020) = 77,64 \cdot \exp(-0,23\Delta/V^2 + 1,44 \ln V^2/\Delta);$$

$$T_K(V, \Delta = 0,0035) = 175,07 \cdot \exp(-0,23\Delta/V^2 + 1,44 \ln V^2/\Delta);$$

$$T_K(V, \Delta = 0,0050) = 289,58 \cdot \exp(-0,24\Delta/V^2 + 1,41 \ln V^2/\Delta).$$

Mais uma vez as constantes  $b_2$  e  $b_3$  pouco variaram, e para fins de consistência, fixou-se  $b_2 = 0,24$  e  $b_3 = 1,41$ .

$$T_K(V, \Delta = 0,0010) = 28,78 \cdot \exp(-0,24\Delta/V^2 + 1,41 \ln V^2/\Delta);$$

$$T_K(V, \Delta = 0,0020) = 77,45 \cdot \exp(-0,24\Delta/V^2 + 1,41 \ln V^2/\Delta);$$

$$T_K(V, \Delta = 0,0035) = 173,49 \cdot \exp(-0,24\Delta/V^2 + 1,41 \ln V^2/\Delta);$$

$$T_K(V, \Delta = 0,0050) = 291,16 \cdot \exp(-0,24\Delta/V^2 + 1,41 \ln V^2/\Delta).$$

$b_1$  e  $\Delta$  apresentaram uma relação não linear:  $b_1 = 616116,65 \cdot \Delta^{1,45}$ . Dessa forma,

a expressão  $T_K(V, \Delta)$  foi:

$$T_K(V, \Delta) = 616116,65\Delta^{1,45} \cdot \exp(-0,24\Delta/V^2 + 1,41 \ln V^2/\Delta). \quad (4.8)$$

Os ajustes obtidos partindo-se da equação 4.6 e chegando a equação 4.8 são apresentados logo abaixo:

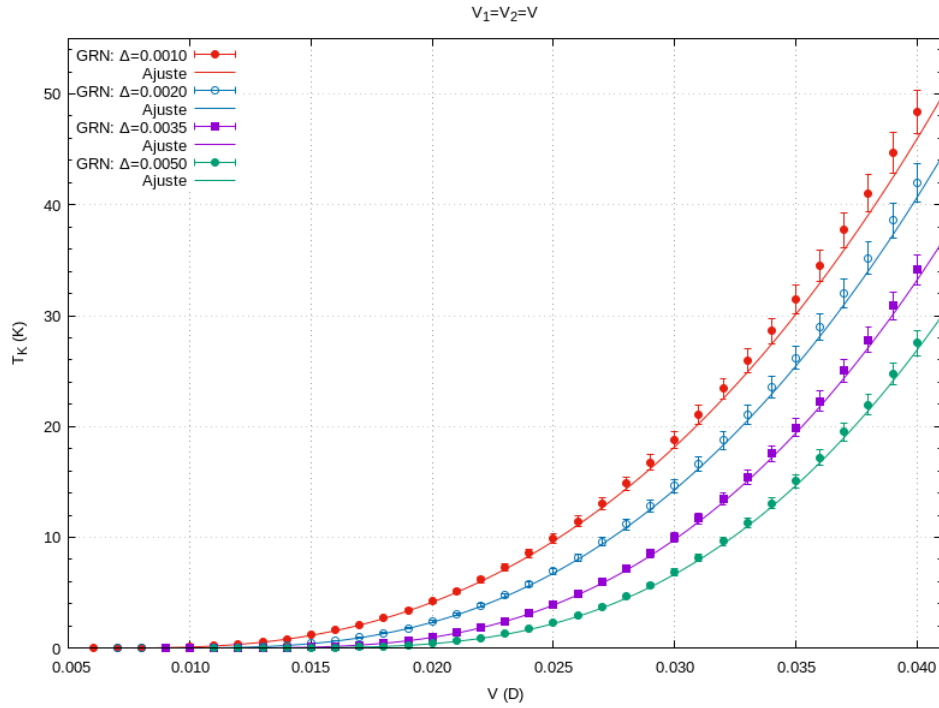


Figura 18 – Gráfico de  $T_K$  em função de  $V$ . As linhas são o ajuste obtido:  $T_K = 616116,65\Delta^{1,45} \cdot \exp(-0,24\Delta/V^2 + 1,41 \ln V^2/\Delta)$  e os círculos e quadrados com barra de erro são os valores de  $T_K$  calculados pelo GRN.

O erro relativo entre o ajuste e o calculado pelo GRN ficou abaixo de 10% para os valores:

$$V \geq 0,0070, \Delta = 0,0010;$$

$$V \geq 0,0090, \Delta = 0,0020;$$

$$V \geq 0,0110, \Delta = 0,0035;$$

$$V \geq 0,0110, \Delta = 0,0050.$$

O caso isotrópico ( $V_1 = V_2$ ) mostrou que na disputa do acoplamento entre os elétrons de cada banda de condução e a impureza, nenhum canal prevalece, e tem por efeito diminuir a temperatura em que o efeito Kondo ocorre, se comparado aos demais casos ( $V_1 \neq V_2$ ). As expressões matemáticas de  $T_K$  presentes na literatura não são suficientes para descrever esse caso.

### 4.3 Impureza acoplada aos dois canais ( $V_1, V_2$ )

A impureza magnética no MADC pode estar acoplada aos dois canais  $V_1$  e  $V_2$  de forma anisotrópica ( $V_1 \neq V_2$ ). O maior acoplamento prevalece na interação e blinda o spin da impureza. Foi fixado o valor de  $V_1$  e variado  $V_2$ , e foi verificado que há dois comportamentos bem distintos da temperatura Kondo  $T_K$ :  $V_2 < V_1$  e  $V_2 > V_1$ .

#### 4.3.1 Impureza acoplada aos dois canais: $V_2 \leq V_1$

Como não foi encontrada na literatura uma definição que permita calcular  $T_K(V_1, V_2, \Delta)$ , primeiramente buscou-se verificar o tipo de comportamento que o gráfico de  $T_K$  versus  $V_2$  exibia. A função que melhor se ajustou foi a Gaussiana: o valor máximo de  $T_K$  ocorreu quando  $V_2 = 0$  e o mínimo sempre próximo a  $V_1 = V_2$ . Após esse valor,  $T_K$  crescia novamente. Tomou-se o ponto de partida a função de Gauss na forma:

$$T_k = c_1 \cdot \exp(-c_2 V_2^2 / \Delta). \quad (4.9)$$

Embora fosse possível calcular  $c_1$  e  $c_2$  de forma livre,  $c_1$  sempre se ajustava com valor próximo ao  $T_K$  máximo, e para fins de simplificação, arbitrariamente adotou-se  $c_1 = T_K(V_1, V_2 = 0, \Delta)$  e  $c_2$  ficou livre para variar. Descobriu-se que o termo exponencial não dependia do valor de  $\Delta$ . Logo, a gaussiana passou a ser

$$T_k = T_K(V_2 = 0) \cdot \exp(-c V_2^2). \quad (4.10)$$

A nova constante  $c$  quase não variou, e foi possível fixar um valor para ela, que melhor se ajustasse aos diversos  $\Delta$  e sem prejudicar o ajuste.

$$T_K(V_1 = 0,02, V_2, \Delta) = T_K(V_1, V_2 = 0, \Delta) \cdot \exp(-5831,70 V_2^2);$$

$$T_K(V_1 = 0,03, V_2, \Delta) = T_K(V_1, V_2 = 0, \Delta) \cdot \exp(-2140,50 V_2^2);$$

$$T_K(V_1 = 0,04, V_2, \Delta) = T_K(V_1, V_2 = 0, \Delta) \cdot \exp(-1062,10 V_2^2).$$

Na busca por mais universalidade ao ajuste, a constante  $c$  foi ajustada em função de  $V_1$  e  $T_K$ :

$$T_k = T_K(V_1, V_2 = 0, \Delta) \cdot \exp(-0,38 V_1^{-2,47} V_2^2). \quad (4.11)$$

$T_K(V_1, V_2 = 0, \Delta)$  é o caso da impureza acoplada a apenas um dos canais, já calculado em capítulo anterior. Substituindo 4.7 (com as constantes já calculadas) na equação 4.11:

$$T_k(V_1, V_2 < V_1, \Delta) = 133237,73 \Delta \cdot \exp(-0,21 \Delta / V_1^2 + 1,07 \ln V_1^2 / \Delta) \cdot \exp(-0,38 V_1^{-2,47} V_2^2). \quad (4.12)$$

Os ajustes obtidos com 4.12 são apresentados logo abaixo:

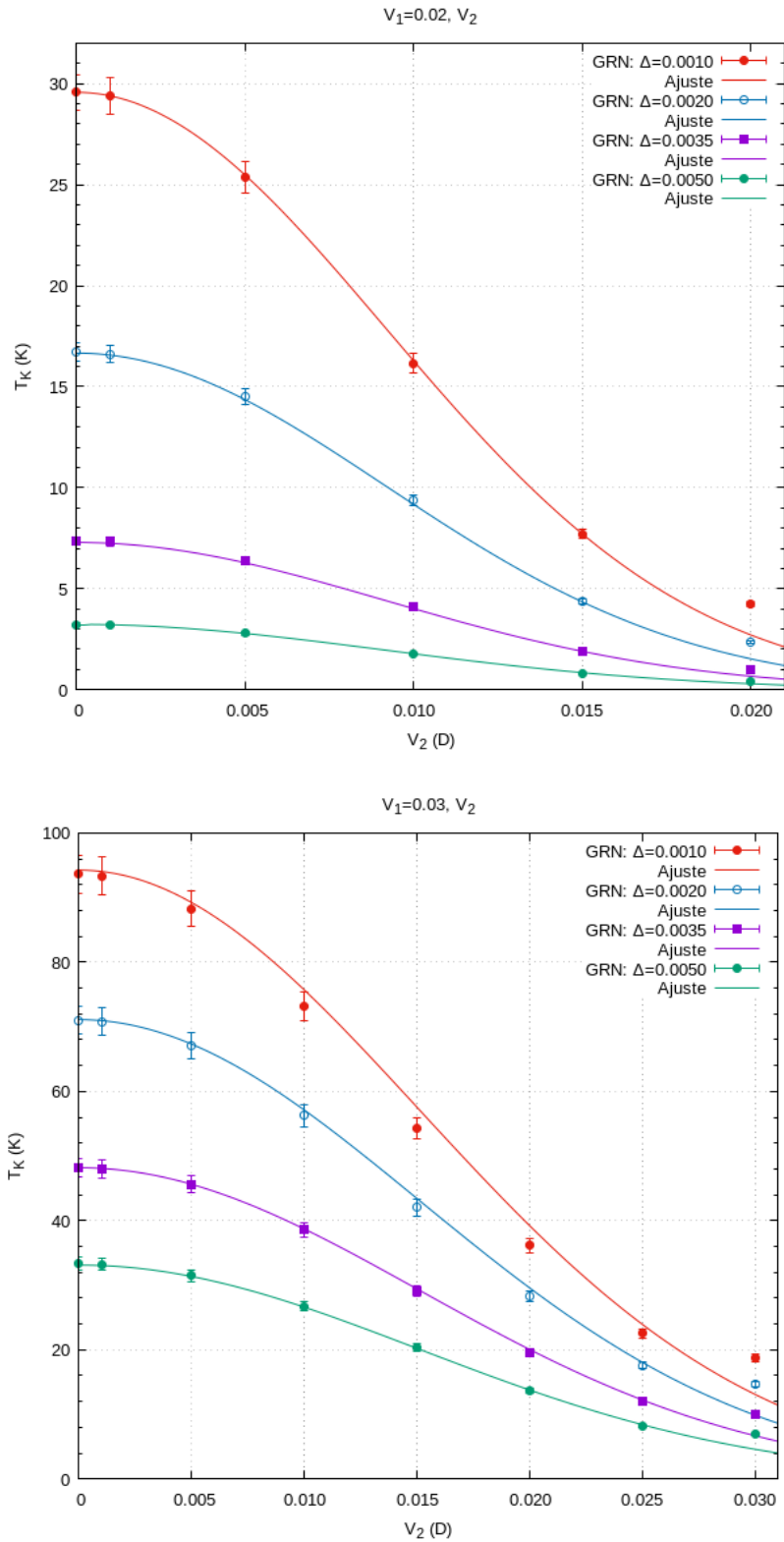


Figura 19 – Gráficos de  $T_K$  em função de  $V_2$ . As linhas são o ajuste obtido:  $T_K = 133237, 73\Delta \cdot \exp(-0, 21\Delta/V_1^2 + 1, 07 \ln V_1^2/\Delta) \cdot \exp(-0, 38V_1^{-2,47}V_2^2)$  e os círculos e quadrado com barra de erro são os valores de  $T_K$  calculados pelo GRN.

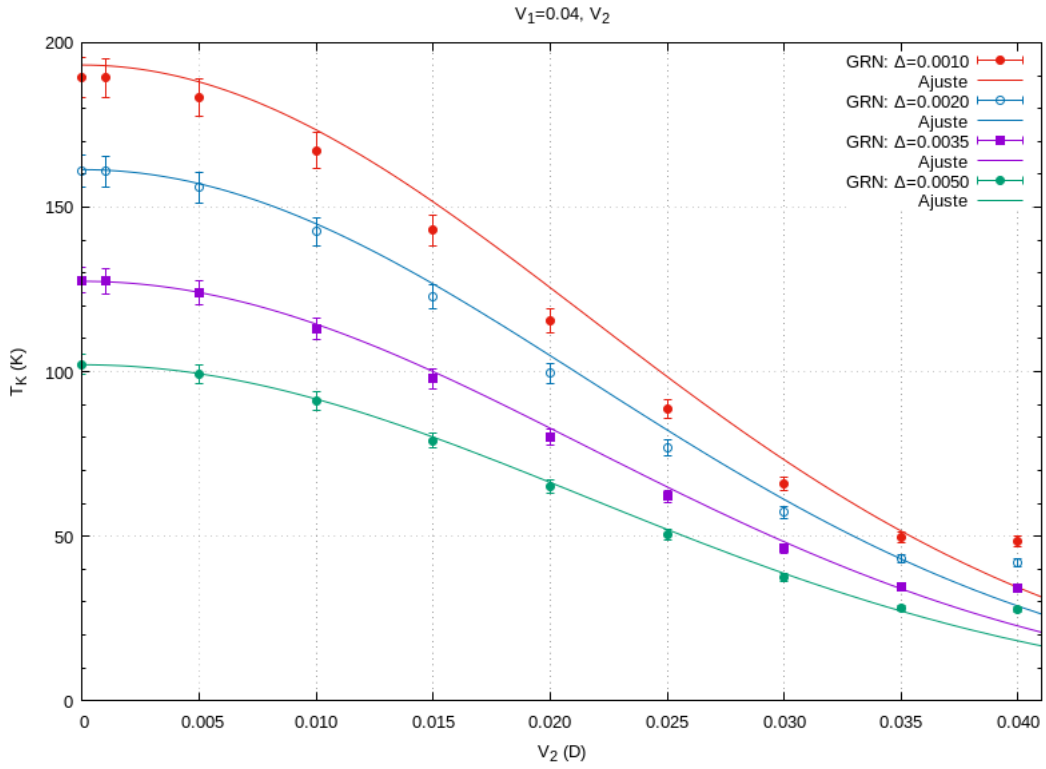


Figura 20 – Gráfico de  $T_K$  em função de  $V_2$ . As linhas são o ajuste obtido:  $T_K = 133237,73\Delta \cdot \exp(-0,21\Delta/V_1^2 + 1,07 \ln V_1^2/\Delta) \cdot \exp(-0,38V_1^{-2,47}V_2^2)$  e os círculos e quadrado com barra de erro são os valores de  $T_K$  calculados pelo GRN.

Enquanto  $V_2$  não se aproxima de  $V_1$ , os ajustes ficaram com erro abaixo de 10% se comparados com  $T_K$  calculado pelo GRN para:

$$V_1 = 0,02, V_2 \leq 0,0150, \Delta;$$

$$V_1 = 0,03, V_2 \leq 0,0250, \Delta;$$

$$V_1 = 0,04, V_2 \leq 0,0350, \Delta.$$

Quando  $V_1 = V_2$  o erro estimado ficou entre 40% e 50%, sugerindo uma transição para o "estado" isotrópico, isto é, com a impureza igualmente acoplada aos dois canais, cujo comportamento de  $T_K$  é completamente diferente.

#### 4.3.2 Impureza acoplada aos dois canais: $V_2 \geq V_1$

O procedimento utilizado para o caso de  $V_2 > V_1$  é muito semelhante aos casos das subseções anteriores. Em análise aos gráficos de  $T_K$  versus  $V_2$ , ficou evidente que  $T_K$  se comporta de maneira muito parecida com o caso em que a impureza está acoplada a apenas um canal:  $T_k = b_1 \cdot \exp(-b_2\Delta/V_1^2 + b_3 \ln(V_1^2/\Delta))$ .

A equação 4.6 se ajusta aos diversos valores de  $T_K$  calculados pelo GRN, rendendo

constantes diferentes para cada  $V$  e  $\Delta$  adotado. A dificuldade está em conseguir um ajuste mais geral, que com uma única equação retorne  $T_K$  para vários valores de  $V_2$  e  $\Delta$ .

Em um ajuste livre, com as constantes  $b_1$ ,  $b_2$  e  $b_3$ , foram obtidos:

$$T_K(V_1 = 0,01, V_2, \Delta = 0,0010) = 141,53 \cdot \exp(-0,50\Delta/V_2^2 + 1,02 \ln V_2^2/\Delta);$$

$$T_K(V_1 = 0,01, V_2, \Delta = 0,0020) = 274,19 \cdot \exp(-0,34\Delta/V_2^2 + 1,05 \ln V_2^2/\Delta);$$

$$T_K(V_1 = 0,01, V_2, \Delta = 0,0035) = 472,24 \cdot \exp(-0,28\Delta/V_2^2 + 1,04 \ln V_2^2/\Delta);$$

$$T_K(V_1 = 0,01, V_2, \Delta = 0,0050) = 654,87 \cdot \exp(-0,27\Delta/V_2^2 + 0,99 \ln V_2^2/\Delta).$$

A constante  $b_3$  pouco variou, ficando sempre próxima a 1. Fixou-se  $b_3 = 1$  e o ajuste foi

$$T_K(V_1 = 0,01, V_2, \Delta = 0,0010) = 143,84 \cdot \exp(-0,51\Delta/V_2^2 + \ln V_2^2/\Delta);$$

$$T_K(V_1 = 0,01, V_2, \Delta = 0,0020) = 279,81 \cdot \exp(-0,36\Delta/V_2^2 + \ln V_2^2/\Delta);$$

$$T_K(V_1 = 0,01, V_2, \Delta = 0,0035) = 470,15 \cdot \exp(-0,29\Delta/V_2^2 + \ln V_2^2/\Delta);$$

$$T_K(V_1 = 0,01, V_2, \Delta = 0,0050) = 656,73 \cdot \exp(-0,27\Delta/V_2^2 + \ln V_2^2/\Delta).$$

De modo análogo foi feito o mesmo procedimento para  $V_1 = 0,02$  e  $V_1 = 0,03$ , com  $b_3 = 1$ .  $V_1 = 0,04$  não entrou no ajuste porque necessitaria de  $V_2 \geq 0,04$ , intervalo não abordado nessa dissertação.

$$T_K(V_1 = 0,02, V_2, \Delta = 0,0010) = 151,72 \cdot \exp(-1,19\Delta/V_2^2 + \ln V_2^2/\Delta);$$

$$T_K(V_1 = 0,02, V_2, \Delta = 0,0020) = 297,83 \cdot \exp(-0,70\Delta/V_2^2 + \ln V_2^2/\Delta);$$

$$T_K(V_1 = 0,02, V_2, \Delta = 0,0035) = 509,46 \cdot \exp(-0,49\Delta/V_2^2 + \ln V_2^2/\Delta);$$

$$T_K(V_1 = 0,02, V_2, \Delta = 0,0050) = 723,40 \cdot \exp(-0,41\Delta/V_2^2 + \ln V_2^2/\Delta);$$

$$T_K(V_1 = 0,03, V_2, \Delta = 0,0010) = 116,47 \cdot \exp(-1,70\Delta/V_2^2 + \ln V_2^2/\Delta);$$

$$T_K(V_1 = 0,03, V_2, \Delta = 0,0020) = 237,40 \cdot \exp(-0,98\Delta/V_2^2 + \ln V_2^2/\Delta);$$

$$T_K(V_1 = 0,03, V_2, \Delta = 0,0035) = 433,94 \cdot \exp(-0,67\Delta/V_2^2 + \ln V_2^2/\Delta);$$

$$T_K(V_1 = 0,03, V_2, \Delta = 0,0050) = 646,07 \cdot \exp(-0,55\Delta/V_2^2 + \ln V_2^2/\Delta).$$

$b_2$  teve de ser ajustado com um coeficiente linear, além do angular. As expressões matemáticas obtidas pelos ajustes foram:

$$T_K(V_1 = 0,01, V_2, \Delta) = 133317,03\Delta \cdot \exp[-(0,21\Delta + 0,0003)/V_2^2 + \ln V_2^2/\Delta]. \quad (4.13)$$

$$T_K(V_1 = 0,03, V_2, \Delta) = 145496,80\Delta \cdot \exp[-(0,21\Delta + 0,0009)/V_2^2 + \ln V_2^2/\Delta]. \quad (4.14)$$



$$T_K(V_1 = 0,03, V_2, \Delta) = 122725,75\Delta \cdot \exp [-(0,24\Delta + 0,0015)/V_2^2 + \ln V_2^2/\Delta]. \quad (4.15)$$

Os gráficos com as equações 4.13, 4.14 e 4.15 estão apresentados logo abaixo, nas figuras 21, 22 e 23.

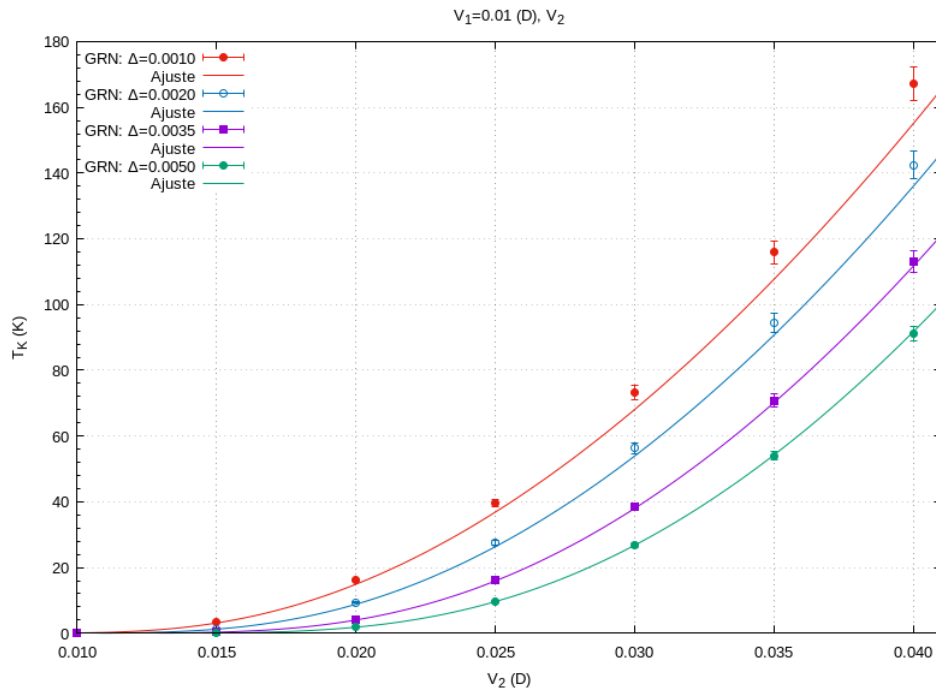


Figura 21 – Gráfico de  $T_K$  em função de  $V_2$ . As linhas são o ajuste obtido:  $T_K = 133317,03\Delta \cdot \exp [-(0,21\Delta + 0,0003)/V_2^2 + \ln V_2^2/\Delta]$  e os círculos e quadrado com barra de erro são os valores de  $T_K$  calculados pelo GRN.

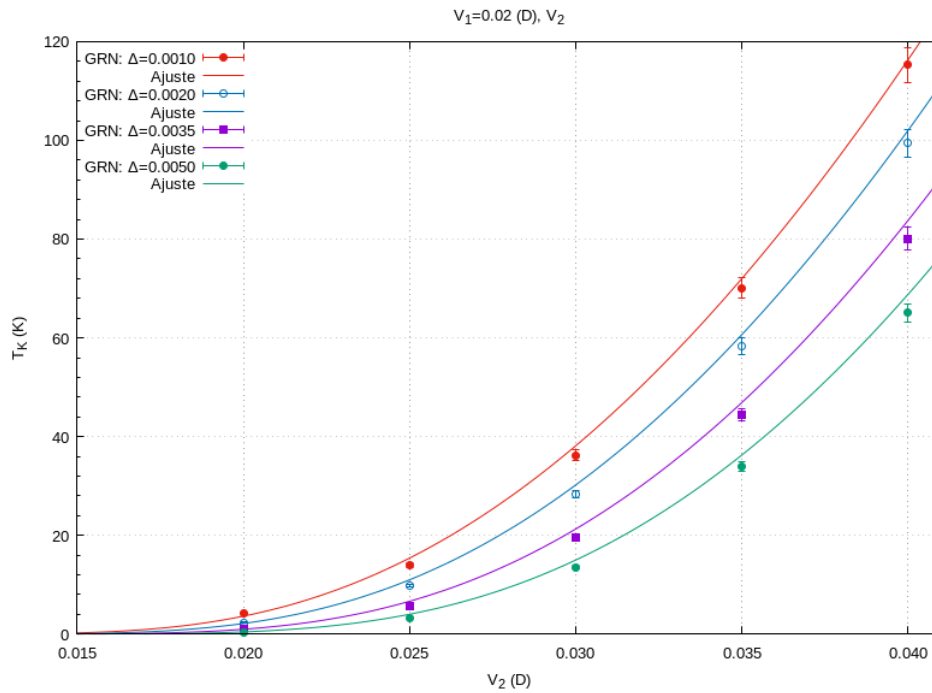


Figura 22 – Gráfico de  $T_K$  em função de  $V_2$ . As linhas são o ajuste obtido:  $T_K = 145496,80\Delta \cdot \exp [-(0,21\Delta + 0,0009)/V_2^2 + \ln V_2^2/\Delta]$  e os círculos e quadrado com barra de erro são os valores de  $T_K$  calculados pelo GRN.

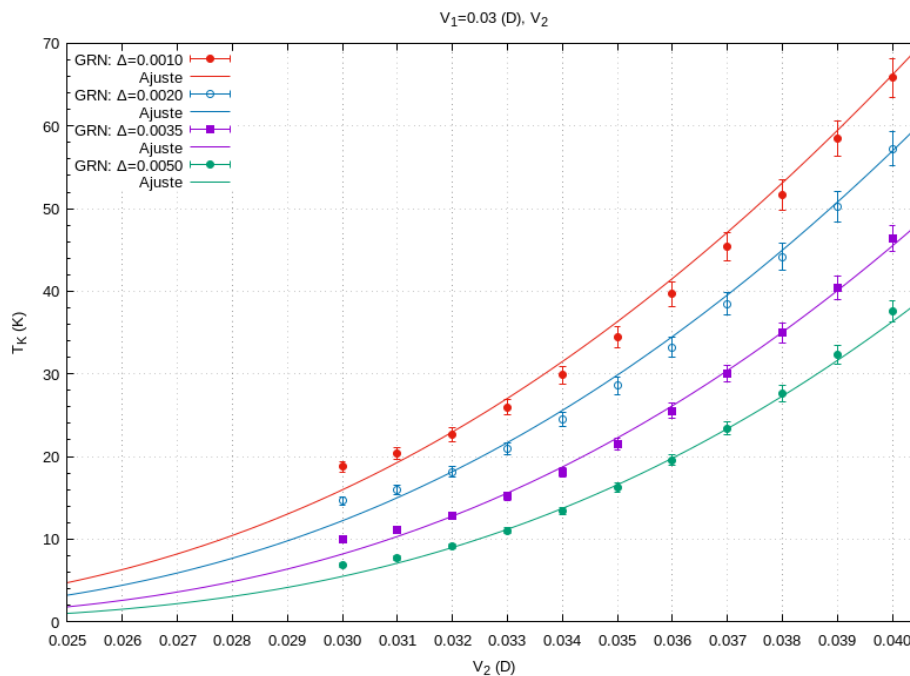


Figura 23 – Gráficos de  $T_K$  em função de  $V_2$ , com  $V_1 = 0,03$  e  $\Delta = 0,0010$ . As linhas são o ajuste obtido:  $T_K = 122725,75\Delta \cdot \exp [-(0,24\Delta + 0,0015)/V_2^2 + \ln V_2^2/\Delta]$  e os círculos e quadrado com barra de erro são os valores de  $T_K$  calculados pelo GRN.

Para  $V_2 > V_1$  não foi possível encontrar  $T_K(V_1, V_2, \Delta)$ , ficamos com uma expressão reduzida e menos geral:  $T_K(V_2, \Delta)$ .

Os ajustes ficaram com erro abaixo de 10% se comparados com  $T_K$  calculado pelo GRN para:

$$V_1 = 0,01, V_2 \geq 0,0200, \Delta;$$

$$V_1 = 0,02, V_2 \leq 0,0300, \Delta;$$

$$V_1 = 0,03, V_2 \leq 0,0310, \Delta.$$

Abaixo dos valores acima ( $V_2$ ), o erro relativo ficou entre 10% e 72%. O ajuste ficou próximo aos valores calculados pelo GRN, exceto para acoplamentos próximos a  $V_1 = V_2$ , cujo comportamento é completamente diferente, de acordo com as expressões obtidas nos diversos ajustes efetuados.

## 5 Conclusão

Nesta dissertação realizamos um estudo sistemático da temperatura Kondo e sua dependência com os parâmetros físicos do modelo de Anderson de dois canais. Para tal, foi necessário compreender as diferenças entre os modelos de Kondo e de Anderson, e em que aspectos ambos são semelhantes.

Com a manipulação do código computacional para o cálculo da temperatura Kondo por meio do GRN, foi possível ver a consistência do método gráfico elaborado por Krishnamurthy et al. até mesmo no caso em que ambos os acoplamentos antiferromagnéticos são iguais. As curvas de susceptibilidade magnética em função da temperatura se mostraram funções universais próximas a  $T_K$ . Em uma estimativa do erro ao se fazer a interpolação linear que nos permite determinar  $T_K$ , o erro ficou entre 3 e 4%, podendo ser muito maior se levarmos em conta o erro numérico da diagonalização do Hamiltoniano do modelo adotado.

Em análise aos parâmetros do MADC, observamos o comportamento de  $T_K$  ao se variar  $V_1$ ,  $V_2$  e  $\Delta$ . Quando a impureza magnética está acoplada a apenas um canal, quanto menor o valor do acoplamento, menor é  $T_K$ , e ao aumentar o acoplamento, aumenta-se  $T_K$ . Elevar  $\Delta$  apenas diminui a temperatura Kondo. No regime isotrópico ( $V_1 = V_2$ ) o comportamento é semelhante, no entanto as temperaturas são muito menores que no caso anterior. Na interação com os dois canais anisotrópicos ( $V_1 \neq V_2 \neq 0$ ) ficou claro dois comportamentos bem distintos, que dependem de qual acoplamento é maior. Para  $V_1$  fixo e  $V_2 < V_1$ ,  $T_K$  em função de  $V_2$  é uma Gaussiana, com a temperatura Kondo tendendo ao seu mínimo quando os dois canais se igualam. Aumentar  $\Delta$  diminui a  $T_K$ . Para  $V_1$  fixo e  $V_2 > V_1$  o comportamento é semelhante ao acoplamento com um só canal e com os dois canais iguais.

Por fim, apresentamos as expressões aproximadas para  $T_K$ . Ao início deste projeto, estávamos abertos a possibilidade de uma função  $T_K(V_1, V_2, \Delta)$  que se ajustasse às superfícies de  $T_K$  calculadas com o GRN. Após extensa revisão de literatura, principalmente nos artigos do Wilson e de Krishnamurthy et al., ficou claro que as expressões analíticas obtidas para  $T_K$  são aproximações válidas para intervalos específicos dos parâmetros, afinal, são resultados da teoria da perturbação. Na busca por ajustes de curvas aos dados numéricos, usamos como ponto de partida e alicerce os resultados analíticos e assim chegamos a expressões semelhantes as já conhecidas, com pequenas modificações, com exceção de  $V_1$  fixo e  $V_2 < V_1$ , que se ajustou a uma Gaussiana e que não foi encontrado nada semelhante na literatura.

A dificuldade encontrada foi conseguir um ajuste o mais geral possível, consistente,

sem sacrificar a física do fenômeno e levando em consideração o erro dos dados com que se trabalha. Desse modo, as expressões de  $T_K$  apresentadas servem como aproximações para o MADC, e ao se levar em conta que nem todo erro gerado no procedimento numérico é conhecido, as expressões apresentadas satisfazem o objetivo do presente trabalho.

Para trabalhos futuros, há a possibilidade de ajustar os resultados do GRN com os dados experimentais de sistemas que apresentam o efeito Kondo e compará-los, seja para  $T_K$  como para a susceptibilidade magnética da impureza, além de testar as expressões de  $T_K$  que foram propostas. Outra possibilidade é o estudo das expressões analíticas da susceptibilidade magnética, resistividade elétrica e calor específico eletrônico existentes na literatura e compará-las ao MADC, e verificar a universalidade de funções do calor específico e da resistividade elétrica e se existem mais formas gráficas de se determinar a temperatura Kondo.

# Referências

- 1 SILVA, L. G. D. da et al. Conductance and Kondo Interference beyond Proportional Coupling. *Physical review letters*, APS, v. 119, n. 11, p. 116801, 2017.
- 2 HAAS, W. D.; BERG, G. Van den. The electrical resistance of gold and silver at low temperatures. *Physica*, Elsevier, v. 3, n. 6, p. 440–449, 1936.
- 3 KONDO, J. Resistance minimum in dilute magnetic alloys. *Progress of theoretical physics*, Oxford University Press, v. 32, n. 1, p. 37–49, 1964.
- 4 POTOK, R. et al. Observation of the two-channel Kondo effect. *Nature*, Nature Publishing Group, v. 446, n. 7132, p. 167–171, 2007.
- 5 ZHANG, Y.-h. et al. Temperature and magnetic field dependence of a Kondo system in the weak coupling regime. *Nature communications*, Nature Publishing Group, v. 4, 2013.
- 6 BULLA, R.; COSTI, T. A.; PRUSCHKE, T. Numerical renormalization group method for quantum impurity systems. *Reviews of Modern Physics*, APS, v. 80, n. 2, p. 395, 2008.
- 7 WILSON, K. G. The renormalization group: Critical phenomena and the Kondo problem. *Reviews of Modern Physics*, APS, v. 47, n. 4, p. 773, 1975.
- 8 FERREIRA, J. et al. Numerical Renormalization Group computation of temperature dependent specific heat for a two-channel Anderson model. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, Elsevier, v. 324, n. 6, p. 1011–1016, 2012.
- 9 KRISHNA-MURTHY, H.; WILKINS, J.; WILSON, K. Renormalization-group approach to the Anderson model of dilute magnetic alloys. i. Static properties for the symmetric case. *Physical Review B*, APS, v. 21, n. 3, p. 1003, 1980.
- 10 SARACHIK, M.; CORENZWIT, E.; LONGINOTTI, L. Resistivity of Mo-Nb and Mo-Re alloys containing 1% Fe. *Physical Review*, APS, v. 135, n. 4A, p. A1041, 1964.
- 11 BLUNDELL, S. *Magnetism in Condensed Matter*. 1. ed. New York: Oxford University Press, 2001.
- 12 KONDO, J. s-d Scattering at Low Temperatures. *Progress of Theoretical Physics*, Oxford University Press, v. 34, n. 2, p. 204–209, 1965.
- 13 ABRIKOSOV, A. A. On the Anomalous Temperature Dependence of the Resistivity of Non-magnetic Metals with a Weak Concentration of Magnetic Impurities. *Soviet Journal of Experimental and Theoretical Physics*, v. 21, p. 660, 1965.
- 14 ANDERSON, P. W. Localized magnetic states in metals. *Physical Review*, APS, v. 124, n. 1, p. 41, 1961.
- 15 SCHRIEFFER, J.; WOLFF, P. Relation between the Anderson and Kondo Hamiltonians. *Physical Review*, APS, v. 149, n. 2, p. 491, 1966.
- 16 ANDERSON, P. A poor man's derivation of scaling laws for the Kondo problem. *Journal of Physics C: Solid State Physics*, IOP Publishing, v. 3, n. 12, p. 2436, 1970.

- 17 ABRIKOSOV, A.; MIGDAL, A. On the theory of the Kondo effect. *Journal of Low Temperature Physics*, Springer, v. 3, n. 5, p. 519–536, 1970.
- 18 FOWLER, M.; ZAWADOWSKI, A. Scaling and the renormalization group in the Kondo effect. *Solid State Communications*, Elsevier, v. 9, n. 8, p. 471–476, 1971.
- 19 WIEGMANN, P. Exact solution of the sd exchange model (Kondo problem). *Journal of Physics C: Solid State Physics*, IOP Publishing, v. 14, n. 10, p. 1463, 1981.
- 20 ANDREI, N. Diagonalization of the Kondo Hamiltonian. *Physical Review Letters*, APS, v. 45, n. 5, p. 379, 1980.
- 21 WIEGMANN, P.; TSVELICK, A. Exact solution of the Anderson model: I. *Journal of Physics C: Solid State Physics*, IOP Publishing, v. 16, n. 12, p. 2281, 1983.
- 22 JAYAPRAKASH, C.; KRISHNA-MURTHY, H.; WILKINS, J. Two-impurity Kondo problem. *Physical Review Letters*, APS, v. 47, n. 10, p. 737, 1981.
- 23 COX, D. Quadrupolar Kondo Effect in Uranium Heavy-Electron Materials? *Physical review letters*, APS, v. 59, n. 11, p. 1240, 1987.
- 24 NOZIERES, P.; BLANDIN, A. Kondo effect in real metals. *Journal de Physique*, Société Française de Physique, v. 41, n. 3, p. 193–211, 1980.
- 25 SEAMAN, C. et al. Evidence for non-Fermi liquid behavior in the Kondo alloy  $Y_{1-x}U_xPd_3$ . *Physical review letters*, APS, v. 67, n. 20, p. 2882, 1991.
- 26 YAMADA, R. et al. Effect of Zn-site substitution with Ga on non-Fermi liquid behavior in  $PrIr_2Zn_{20}$ . *Physica B: Condensed Matter*, Elsevier, 2017.
- 27 LI, Y. et al. Anomalous Kondo resonance mediated by semiconducting graphene nanoribbons in a molecular heterostructure. *Nature Communications*, Nature Publishing Group, v. 8, n. 1, p. 946, 2017.
- 28 FERREIRA, J. V. B. *Modelo de Anderson de dois canais*. Tese (Doutorado) — Universidade de São Paulo, 2000.
- 29 TERNES, M.; HEINRICH, A. J.; SCHNEIDER, W.-D. Spectroscopic manifestations of the Kondo effect on single adatoms. *Journal of Physics: Condensed Matter*, IOP Publishing, v. 21, n. 5, p. 053001, 2008.
- 30 SACRAMENTO, P.; SCHLOTTMANN, P. Applications of the overcompensated n-channel Kondo problem. *Journal of applied physics*, AIP, v. 70, n. 10, p. 5806–5808, 1991.
- 31 STANKIEWICZ, J. et al. Kondo Physics in a Rare Earth Ion with Well Localized 4f Electrons. *Physical review letters*, APS, v. 108, n. 25, p. 257201, 2012.
- 32 FERREIRA, J. V. B. et al. Non-Fermi liquid points of a two-channel Anderson model. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, v. 226-230, p. 196–198, 2001.
- 33 FERREIRA, J. V. et al. Magnetic susceptibility of a two-channel Anderson model. *Journal of magnetism and magnetic materials*, Elsevier, v. 226, p. 132–133, 2001.

- 34 OLIVEIRA, W. C.; OLIVEIRA, L. N. Generalized numerical renormalization-group method to calculate the thermodynamical properties of impurities in metals. *Physical Review B*, APS, v. 49, n. 17, p. 11986, 1994.
- 35 COSTA, S. et al. Numerical renormalization-group computation of specific heats. *Physical Review B*, APS, v. 55, n. 1, p. 30, 1997.
- 36 FERREIRA, J. V.; LÍBERO, V. L.; OLIVEIRA, L. N. Multi-step transformation in numerical renormalization group. *Computer physics communications*, Elsevier, v. 174, n. 11, p. 862–868, 2006.
- 37 LANDAU, L. Oscillations in a Fermi liquid. *SOVIET PHYSICS JETP-USSR*, AMER INST PHYSICS CIRCULATION FULFILLMENT DIV, 500 SUNNYSIDE BLVD, WOODBURY, NY 11797-2999, v. 5, n. 1, p. 101–108, 1957.
- 38 NOZIERES, P. A “Fermi-liquid” description of the Kondo problem at low temperatures. *Journal of low temperature physics*, Springer, v. 17, n. 1-2, p. 31–42, 1974.
- 39 ANDRES, K.; GRAEBNER, J.; OTT, H.  $4f$ -Virtual-Bound-State Formation in  $CeAl_3$  at Low Temperatures. *Physical Review Letters*, APS, v. 35, n. 26, p. 1779, 1975.
- 40 KITTEL, C. *Introduction to Solid State Physics*. 8. ed. New York: Wiley, 2005.
- 41 ISHII, H.; YOSIDA, K. Zero-Temperature Susceptibility of a Localized Spin Exchange Coupled with the Conduction Electrons. *Progress of Theoretical Physics*, Oxford University Press, v. 38, n. 1, p. 61–71, 1967.
- 42 TSVELICK, A.; WIEGMANN, P. Exact results in the theory of magnetic alloys. *Advances in Physics*, Taylor & Francis, v. 32, n. 4, p. 453–713, 1983.
- 43 PEREIRA, L. C.; FERREIRA, J. V. B. Determination of the Kondo temperature from the curves of magnetic susceptibility on a non-Fermi liquid regime. *Matéria (Rio de Janeiro)*, SciELO Brasil, v. 18, n. 3, p. 1360–1372, 2013.
- 44 ASHCROFT, N. W.; MERMIN, N. D. *Solid State Physics*. 1. ed. Philadelphia: Saunders, 1976.
- 45 HEWSON, A. C. *The Kondo Problem to Heavy Fermions*. 1. ed. New York: Cambridge University Press, 1993.