

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA
Dissertação de Mestrado

EFEITO KONDO E MAGNETISMO EM UMA REDE
KAGOME

José Luiz Ferreira Junior

Orientador: Prof. Dr. José Roberto Iglesias

Coorientadora: Profa. Dra. Acirete S. da Rosa Simões

Porto Alegre

2012

Agradecimentos

Agradeço:

- Aos meus orientadores, Prof. Roberto Iglesias e Profa. Acirete Simões, pela amizade e pelas muitas lições ao longo desse trabalho.
- Aos professores do IF-UFRGS, pela formação a mim concedida ao longo da graduação e do mestrado.
- A todos os membros da banca, por terem aceito o convite de fazer parte desta dissertação.
- A Profa. Claudine Lacroix, pelas sugestões neste trabalho e pela cordialidade ao responder minhas frequentes dúvidas.
- Aos amigos e colegas da Física, em especial os membros da sala M208, pela amizade e pelas discussões sobre tudo aquilo que eu mais gosto.
- Aos meus pais, pelo amor e pela educação a mim dados.
- A minha irmã Shanna, pelo exemplo e pelas correções de meu péssimo português.
- Aos demais membros da minha família, pelo carinho a mim demonstrado em todos os momentos.
- A minha namorada Ana Carolina, pela compreensão nos momentos em que não teve minha atenção e pelo companheirismo ao longo deste projeto.
- Ao Pimpo (*in memoriam*), por ter sido meu fiel escudeiro desde guri e pelas muitas madrugadas de estudo em que esteve ao meu lado.

Resumo

Neste trabalho estudamos o modelo da rede de Kondo em uma rede *kagome*, buscando uma maior compreensão dos efeitos da frustração geométrica em sistemas de férmions pesados. Para tanto, fizemos uma aproximação de campo médio no hamiltoniano do sistema que serve para todas as fases do sistema. Analisamos inicialmente o caso não magnético. Obtemos neste limite as energias eletrônicas e as funções de Green necessárias ao cálculo numérico autoconsistente das ocupações e do parâmetro de Kondo. Os resultados encontrados estão em concordância qualitativa com trabalhos publicados em outras geometrias. A seguir analisamos o caso magnético, onde introduzimos uma aproximação suplementar, a qual é compatível com a de campo médio já considerada e, em princípio, existente apenas em sistemas com frustração geométrica. Realizamos cálculos autoconsistentes através de somas sobre as frequências de Matsubara. Os resultados mostram que não há coexistência entre ordem magnética e efeito Kondo, além de haver a supressão do antiferromagnetismo com o aumento de temperatura e variações no preenchimento de bandas.

Palavras chave: frustração geométrica, modelo da rede de Kondo, férmions pesados, rede *kagome*.

Abstract

In this work we study the Kondo Lattice model for the kagome lattice, in order to understand better the effects of geometrical frustration in heavy-fermion systems. In this context, we consider a mean field scheme valid for all the system's phases. Firstly, we analyzed the nonmagnetic case. In this approximation the electron energies and spectral functions are reachable, then we use the density of states to calculate the occupations self-consistently. Our results are qualitatively compared with previous works in other geometries. In the second part we introduce an approximation for magnetism, which takes into account the mean field scheme considered and the presence of geometrical frustration. Self-consistent calculations are done through the frequencies summation method. Our results show that the magnetism is suppressed when the temperature is increased or the band filling deviates from half-filling. Besides, the coexistence of magnetic order and Kondo effect is not observable.

Keywords: geometrical frustration, Kondo lattice model, heavy fermions, *kagome* lattice.

Comentários sobre a notação

Durante todo o presente trabalho serão utilizadas as definições $\hbar = 1$ e $k_B = 1$, portanto energias, temperaturas e frequências aqui consideradas terão a mesma dimensão. Além disso, todas as energias estarão normalizadas pela energia de *hopping* dos elétrons de condução t , diferentemente do usual em trabalhos dessa natureza, em que tipicamente é utilizada a meia largura de banda W . Por fim, iremos considerar que a situação $J > 0$ refere-se ao caso antiferromagnético.

Sumário

Sumário	v
1 Introdução	1
1.1 Redes de Kondo	1
1.1.1 Estados Eletrônicos	1
1.1.2 Problema de uma impureza: Modelos de Anderson e de Kondo	3
1.1.3 Modelo da Rede de Kondo	5
1.1.4 Férmions Pesados	7
1.2 Frustração Geométrica	7
1.2.1 Medidas de frustração	8
1.2.2 Aspectos Experimentais	10
1.2.3 Redes <i>kagome</i> e estado de líquido de spin	11
1.3 Frustração em sistemas de elétrons itinerantes	13
2 O Modelo da rede de Kondo na rede <i>kagome</i>	15
2.1 Bandas de condução	18
2.2 Aproximação de Campo Médio	19
2.3 Funções de Green	22

3	Caso Não Magnético	24
3.1	Funções de Green	25
3.2	Resultados	27
3.2.1	Efeito da hibridização nas bandas	28
3.2.2	Cálculos autoconsistentes	29
4	Caso Magnético	33
4.1	Aproximação PKS no hamiltoniano de campo médio	35
4.2	Resultados Numéricos	37
5	Conclusões e Perspectivas	40
	Apêndices	42
A	Método de Chadi-Cohen	43
A.1	Pontos especiais para a rede <i>kagome</i>	45
B	Cálculos de números de ocupação	48
B.1	Método da Densidade de Estados	48
B.2	Método da soma sobre as frequências de Matsubara	50
C	Hamiltoniano de Heisenberg para a rede <i>kagome</i>	53
	Referências Bibliográficas	56

Capítulo 1

Introdução

Nesse trabalho será feito o estudo dos efeitos de frustração geométrica no modelo da Rede de Kondo. Por tratarem-se de fenômenos tipicamente desassociados, é conveniente que estes sejam apresentados de forma separada neste capítulo introdutório. Ao fim do capítulo será feita uma rápida motivação experimental para o presente estudo e seus objetivos.

1.1 Redes de Kondo

1.1.1 Estados Eletrônicos

As Redes de Kondo estão dentro de uma classe de sistemas em que há a coexistência de elétrons itinerantes e localizados. Nesse tipo de sistema os graus de liberdade de carga e momento magnético estão inter-relacionados, produzindo efeitos e fases não-triviais que podem ser observados nas propriedades elétricas e magnéticas de alguns materiais.

A descrição da condutividade elétrica de sólidos através de Mecânica Quântica está baseada no cálculo da estrutura de bandas. Para efetuar tais cálculos existem diversas abordagens, sendo duas as mais “tradicionais”: a aproximação de elétrons quase-livres e o modelo *tight-binding* ou de ligações fortes ¹.

¹Salienta-se a importância de outros métodos não abordados neste trabalho, como a Teoria do Funcional de Densidade, que é largamente utilizada em trabalhos mais recentes por sua fácil **inserção** em cálculos

No modelo de elétrons quase-livres são desprezadas as interações entre os elétrons de valência e os íons, preservando apenas a periodicidade do potencial da rede. Esta é uma boa aproximação para metais, pois o transporte eletrônico nesses materiais é feito por elétrons de subníveis mais afastados do núcleo (bandas s e p) e estes sentem fracamente o potencial nuclear por conta da blindagem produzida pelas camadas internas. Como consequência, as funções de onda dos elétrons apresentam um caráter deslocalizado, próximo ao comportamento de ondas planas dos elétrons livres.

Para o modelo *tight-binding* assume-se que o potencial nuclear é grande, de modo que os orbitais dos átomos isolados são pouco sobrepostos quando estes formam a estrutura cristalina, então os estados eletrônicos são combinações de orbitais atômicos². Este modelo é propício para a descrição de isolantes e para sistemas de bandas estreitas, típicos de bandas d e f , dada a natureza localizada desses orbitais.

As propriedades magnéticas também são fortemente dependentes do caráter dos elétrons do sistema, uma vez que são estes (através de seus momentos magnéticos) os responsáveis pelo magnetismo microscópico. Para isolantes, o magnetismo é de momentos localizados: as interações são bem descritas por hamiltonianos cujos graus de liberdade são spins, por exemplo, o hamiltoniano de Heisenberg. A característica elementar desses sistemas é a existência de duas fases distintas: a fase paramagnética, em que o comportamento é de momentos independentes, e uma fase ordenada a temperaturas abaixo daquela em que há o ordenamento magnético. A fenomenologia desse tipo de sistema é riquíssima e iremos nos aprofundar na questão adiante, ao tratarmos da frustração magnética.

Sistemas de elétrons itinerantes apresentam graus de liberdade de carga, o que impossibilita o uso de hamiltonianos puramente de spin. Apesar disso, o magnetismo de banda, como é tipicamente denominado o comportamento destes sistemas, pode apresentar também duas fases distintas. Desprezando a interação elétron-elétron, o sistema se comporta como um gás de elétrons e o comportamento é paramagnético (com uma redução proveniente do diamagnetismo de Landau). Efeitos de interação podem, dependendo da intensidade da

computacionais e sua capacidade de lidar com cálculos de sistemas realísticos complexos.

²Rigorosamente seriam combinações lineares de funções de Wannier, mas estas são similares aos orbitais atômicos no limite considerado.

repulsão coulombiana e do número de estados no nível de Fermi (critério de Stoner), desestabilizar a fase paramagnética e gerar uma fase ferromagnética ou de ondas de densidade de spin.

Naturalmente a situação é ainda mais complexa quando há a coexistência de elétrons de condução e elétrons localizados, pois evidentemente nenhuma das duas abordagens mencionadas acima é suficiente para descrever completamente esse tipo de sistema. No início da década de 60 surgiu o primeiro modelo que visava atacar o problema da coexistência de elétrons localizados e itinerantes: o modelo da impureza de Anderson [1].

1.1.2 Problema de uma impureza: Modelos de Anderson e de Kondo

O Modelo de Anderson [1] foi proposto inicialmente para descrever a formação de momentos magnéticos em metais e caracteriza-se pelo seu hamiltoniano:

$$\mathcal{H} = -t \sum_{\langle i,j \rangle \sigma} \left(c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + c_{j\sigma}^\dagger c_{i\sigma} \right) + E_f \sum_{\sigma} f_{\sigma}^\dagger f_{\sigma} + U f_{\uparrow}^\dagger f_{\uparrow} f_{\downarrow}^\dagger f_{\downarrow} + \sum_{i\sigma} \left(V_i f_{\sigma}^\dagger c_{i\sigma} + V_i^* c_{i\sigma}^\dagger f_{\sigma} \right). \quad (1.1)$$

O primeiro termo descreve os elétrons de condução na aproximação *tight-binding*, enquanto o segundo e o terceiro termo são referentes a um nível localizado (relativos a um orbital do tipo f), em que há uma energia de ocupação E_f e uma repulsão coulombiana U interna. O último termo representa uma hibridização entre elétrons de condução e elétrons do orbital f .

A formação do momento localizado ocorre sempre que o estado de menor energia é aquele em que existe apenas um elétron no orbital, uma vez que as configurações com zero ou dois elétrons resultam em $S_{TOT} = 0$. Esse regime é atingido quando o nível de Fermi está entre E_f e $2E_f + U$, que é uma situação típica de átomos “magnéticos” postos num regime diluído em uma matriz metálica de um bom condutor (por exemplo, a adição de Fe em uma matriz de Au).

Estando interessados no regime em que já existe a formação do momento localizado, é interessante reduzir o problema ao estudo de um hamiltoniano efetivo que contemple apenas o regime de baixa energia do modelo de Anderson. Isso é possível de ser feito através de uma

transformação canônica que mantém o sistema apenas no subespaço em que a ocupação do nível f seja unitária (limite $U \rightarrow \infty$), o que é conhecida como *Transformação de Schrifffer-Wolff* [2]. De tal transformação obtém-se o hamiltoniano s-d, também conhecido como hamiltoniano de Kondo:

$$\mathcal{H} = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \epsilon(\mathbf{k}) c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} + J_K \mathbf{S} \cdot \mathbf{s}. \quad (1.2)$$

A hibridização entre os elétrons de condução e o nível localizado aqui aparece em um termo de troca entre o spin do momento localizado e a densidade de spins dos elétrons de condução no sítio em que há a impureza. Esse acoplamento antiferromagnético afeta a condução elétrica do material através de um termo logaritmo na temperatura, conforme foi mostrado por J. Kondo [3] em 1964 a partir de teoria de perturbação. Portanto, a temperaturas suficientemente baixas (em que o espalhamento por fônons deixa de ser importante), há o aparecimento de um mínimo na resistividade elétrica característico do efeito Kondo.

Apesar de Kondo ter oferecido uma boa explicação para a presença do mínimo de resistividade, o comportamento logarítmico é divergente para $T < T_K$ e a teoria de perturbação claramente falha nesse limite. A correta descrição desse regime veio em meados da década de 70, a partir do trabalho de K. G. Wilson usando o método não-perturbativo de Grupo de Renormalização Numérico (NRG) [4].

Resumidamente, a grande contribuição de Wilson foi demonstrar que, para $T = 0$, o acoplamento entre a impureza e a densidade eletrônica é tão grande que há a formação de um estado singleto entre esses dois. Sendo um singleto, tal estado possui $S = 0$ e é observada a blindagem da impureza pelos elétrons de condução. Consequentemente os demais elétrons de condução deixam de interagir com a impureza e a resistividade volta a se comportar como a de um metal sem impurezas, porém com coeficientes modificados por conta da blindagem.

A temperatura na qual ocorre o mínimo de energia é a que define a escala de energia do efeito Kondo e é denominada temperatura Kondo (T_K). Esta temperatura se relaciona com J_K através da relação

$$T_K = W \exp\left(-\frac{1}{|J_K \rho|}\right), \quad (1.3)$$

onde W é a largura de banda e ρ a densidade de estados no nível de Fermi [5].

A presença da impureza magnética induz uma polarização dos elétrons de condução,

pois estes desempenham o papel de blindá-la a temperaturas baixas. Observa-se então a formação de oscilações na polarização eletrônica cuja amplitude cai ao se afastar da impureza, efeito que é chamado de *Oscilações de Friedel* (figura 1.1) [5,6]. Isso significa que há um acoplamento magnético efetivo por conta da impureza e este é dependente de posição em módulo e intensidade. Logo, havendo um segundo momento magnético no sistema, este teria uma interação efetiva com a impureza descrita por um hamiltoniano do tipo:

$$\mathcal{H} = J_{RKKY} \mathbf{S}(\mathbf{R}) \cdot \mathbf{S}(0) \quad J_{RKKY} \sim \frac{\sin(2k_f R) - 2k_f R \cos(2k_f R)}{(k_f R)^4}. \quad (1.4)$$

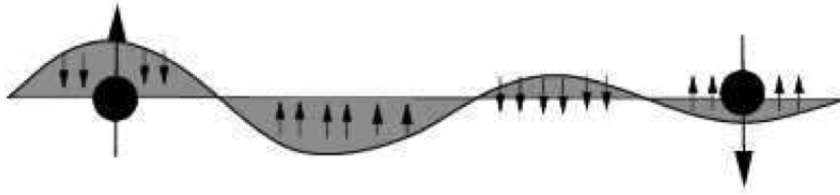


Figura 1.1: Oscilações de Friedel: a interação de troca entre impurezas ocorre por intermédio dos elétrons de condução.

No regime diluído, a distância entre impurezas é grande e não é necessário incluir o termo de troca proveniente da interação RKKY, porém este não pode ser desprezado quando a concentração de impurezas é significativa. Uma dessas situações ocorre em metais com elementos terras raras cujos íons apresentam ocupação das camadas 4f, por exemplo, a configuração Ce^{3+} no composto CeCu_2Si_2 .

1.1.3 Modelo da Rede de Kondo

No regime muito concentrado de impurezas, em que exista um momento localizado por sítio da rede, podemos fazer uma generalização do hamiltoniano (1.2) chamada de Modelo da Rede de Kondo:

$$\mathcal{H} = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \varepsilon_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} + J_K \sum_i \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{s}_i. \quad (1.5)$$

Este hamiltoniano inclui tanto a interação Kondo quanto a interação RKKY, porém a segunda é gerada dinamicamente a partir da primeira. Logo ambas apresentam a mesma

origem microscópica e suas energias características são dependentes do mesmo parâmetro $|J_K\rho|$.

No caso do efeito Kondo, a energia característica é a temperatura Kondo (para uma impureza), que é proporcional a $\exp(-1/|J_K\rho|)$. Para a interação RKKY, a energia característica está associada à temperatura de ordenamento magnético, que para o caso antiferromagnético é a temperatura de Néel. Esta é proporcional a $|J_K\rho|^2$, pois a interação de troca indireta entre dois momentos envolve dois processos de troca entre um momento e a distribuição de elétrons de condução.

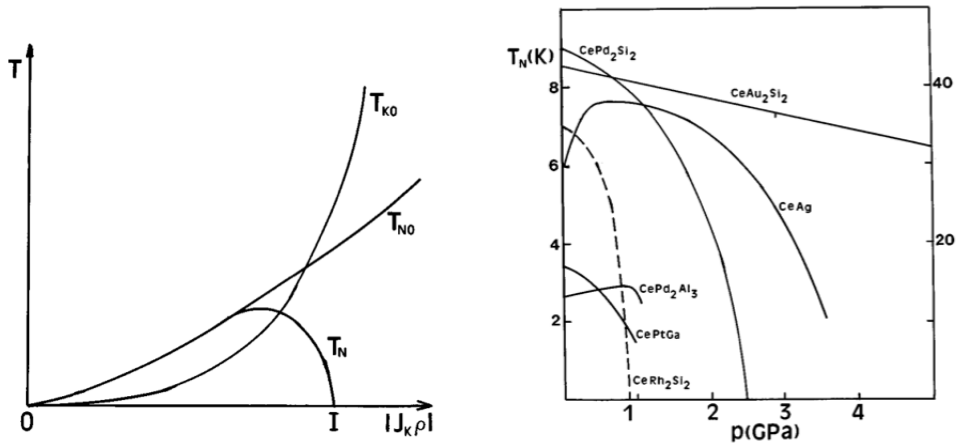


Figura 1.2: **Esq.:**Diagrama de Doniach: $T_{K0} \sim \exp(-1/|J_K\rho|)$, $T_{N0} \sim |J_K\rho|^2$ e T_N é a temperatura de Néel do sistema levando em conta a competição entre os dois efeitos. **Dir.:** Resultados experimentais de T_N em função da pressão para compostos de cério mostram a supressão da ordem magnética pelo efeito Kondo.

Por serem interações competitivas, uma vez que o efeito Kondo blinda parcialmente (ou completamente) o momento localizado, espera-se que o sistema varie significativamente de acordo com o parâmetro que mede tais interações. Observando essa situação, S. Doniach [7] propôs um diagrama (Diagrama de Doniach) que explicaria o comportamento de uma série de compostos de cério e itérbio em que a existência da ordem magnética é dependente de pressão. Para valores de $|J_K\rho|$ em que $T_N > T_K$ a ordem magnética é obtida para temperaturas intermediárias a estas duas, porém o momento magnético é reduzido por conta da blindagem oriunda do efeito Kondo. Para $T_K > T_N$, os momentos magnéticos estão blindados e o sistema é um líquido de Fermi com uma drástica alteração na massa efetiva

dos elétrons, que os caracteriza como sistemas de férmions pesados.

1.1.4 Férmions Pesados

Sistemas de férmions pesados é o nome dado para compostos metálicos em que os coeficientes de Sommerfeld e da susceptibilidade de Pauli são, a baixas temperaturas ($\sim 10\text{K}$), três ordens de grandeza maiores que os de metais tradicionais, como se os elétrons presentes nesses materiais tivessem massa efetiva muito maior que a de elétrons livres. A descoberta desse tipo de material foi feita por Andres et al. em 1975, através de medidas de calor específico do composto metálico CeAl_3 .

Por estarem na proximidade de um ponto crítico quântico [6], esses materiais exibem uma variedade grande de comportamentos. Existem isolantes de Kondo ($\text{Ce}_3\text{Pt}_4\text{Bi}_3$ e CeNiSn), supercondutores (UPb_3 , CeCoIn_5), supercondutores com ordem magnética (UPd_2Al_3 e URu_2Si_2), etc.

Os elétrons de orbitais $4f$ e $5f$ nesses materiais são “pesados” por consequência da hibridização entre o nível localizado e as bandas de condução, que produz uma pequena largura de banda para esses elétrons. De acordo com a teoria do líquido de Fermi, o volume da superfície de Fermi é proporcional ao número de elétrons de condução (Teorema de Luttinger), permitindo que a natureza itinerante desses elétrons seja experimentalmente observada via oscilações quânticas (experimentos de de Haas-van Alphen e Shubnikov-de Haas) ou em experimentos de ARPES (*Angle Resolved Photoemission Spectroscopy*) [8].

1.2 Frustração Geométrica

Frustração é a incapacidade de um sistema atingir o estado de menor energia por consequência de interações competitivas, que podem ser originadas tanto por desordem quanto por propriedades estruturais do material. No presente trabalho estaremos mais interessados no segundo tipo de frustração, chamada de *Frustração Geométrica*.

Tomemos o típico exemplo de três spins dispostos em um triângulo em que há uma

interação antiferromagnética (AF) do tipo Ising entre eles, isto é, os spins possuem apenas dois estados (up ou down). Ao posicionarmos dois desses spins anti-paralelamente, observa-se que o terceiro não será capaz de minimizar simultaneamente as interações com os outros dois e o estado de mais baixa energia do sistema é duplamente degenerado e tem energia $-J$.

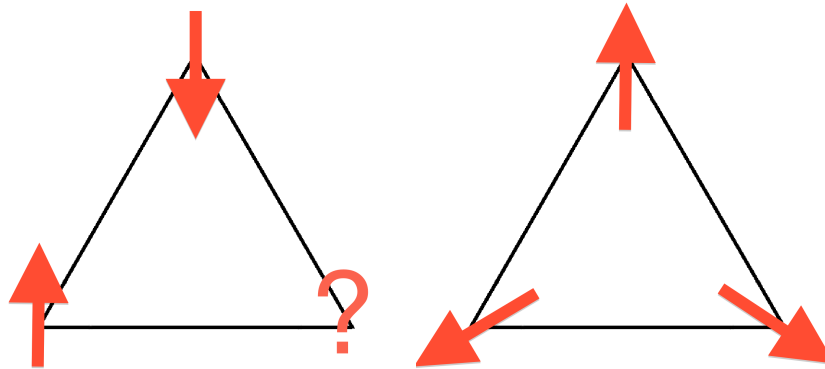


Figura 1.3: Para spins Ising (à esquerda) não há uma configuração única que minimiza a energia e o sistema é frustrado. Considerando spins Heisenberg (à direita), a frustração desaparece.

Para o mesmo exemplo do triângulo, podemos considerar ordens não colineares a partir do hamiltoniano de Heisenberg. Nesse caso, o sistema consegue atingir uma configuração de menor energia, na qual a orientação dos três spins difere-se por um ângulo de 120 graus. Essa configuração apresenta uma energia $-3/2J$, evidentemente menor que a do caso Ising.

Tendo triângulos como “blocos fundamentais”, podemos construir estruturas periódicas que exibem frustração geométrica, como por exemplo, as redes 2D triangular e *kagome*, e a rede 3D pirocloro (figura 1.4).

1.2.1 Medidas de frustração

Apresentado superficialmente o conceito de frustração geométrica, podemos discutir formas de quantificá-la para diferentes estruturas. Para fazê-lo, existem diversos cálculos teóricos que são interessantes, entre eles o cálculo de entropia à temperatura zero e o cálculo do número de graus de liberdade de estados fundamentais clássicos.

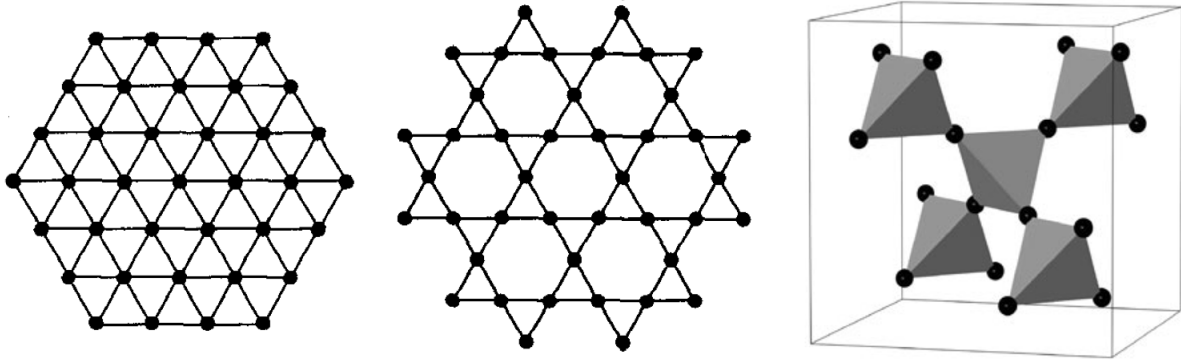


Figura 1.4: Da direita para a esquerda: rede triangular (2D), rede *kagome* (2D) e rede pirocloro (3D).

De acordo com o postulado de Nerst, a entropia de um sistema à temperatura nula deve ser determinada pela degenerescência de seu estado fundamental, sendo estritamente zero caso o sistema não seja degenerado. Portanto o cálculo da entropia residual (temperatura zero) pode quantificar o número de estados degenerados de menor energia, tornando possível a comparação de diferentes sistemas.

Para o nosso exemplo do triângulo, a entropia residual por sítio é $S = 1/3 \ln 2$. Para as redes triangulares e *kagome*, considerando ainda o modelo de Ising, as entropias residuais por sítio³ são $S \approx 0.32$ e $S = 0.5$, respectivamente [9]. Isso indica que a rede *kagome* é mais frustrada que a rede triangular.

Uma segunda forma de medirmos a frustração é fazendo uma estimativa do número de graus de liberdades existentes em sistemas clássicos. Esse tipo de contagem foi introduzida por Maxwell em 1864 para a discussão da estabilidade de sistemas mecânicos, sendo aplicada em sistemas frustrados somente em 1998 por R. Moessner e J. Chalker [10].

O argumento da contagem baseia-se no fato de que o número de graus de liberdade presentes nos estados fundamentais de um sistema deve ser dado pela diferença entre o número total de graus de liberdade deste (F) e o número de vínculos que devem existir nos estados fundamentais (K). Se todos os vínculos fossem independentes, os graus de liberdade

³No limite termodinâmico o número de estados degenerados é infinito, pois este é uma grandeza extensiva tal como a entropia. Portanto, para fins de comparação, é necessário calcular a entropia por sítio.

do estado fundamental seriam $D = F - K$.

Se voltarmos ao nosso exemplo do triângulo para o caso Heisenberg, vimos que o estado de mais baixa energia é único, ignorando as simetrias globais do sistema. Tal sistema possui 6 graus de liberdade (dois para cada spin) e três vínculos no estado fundamental, pois nesse estado a soma das componentes dos spins nas três direções deve ser nula. Considerando que existem três outros vínculos associados às rotações globais do sistema, chegamos a conclusão que não há graus de liberdade para o estado fundamental nesse caso, portanto não há frustração.

Estendendo a discussão para redes, levando em conta as correções de vínculos não independentes, podemos observar que os valores para as redes *kagome* e pirocloro são $D = N/9$ e $D = N/2$, respectivamente (N é o número de sítios). Tal resultado mostra que os graus de liberdade desses sistemas são quantidades extensivas.

1.2.2 Aspectos Experimentais

Após apresentarmos os aspectos teóricos pertinentes aos sistemas frustrados, é conveniente apresentarmos rapidamente as principais características experimentais desses tipos de compostos, comparando-as com sistemas em que há o ordenamento magnético. Uma discussão completa dos aspectos experimentais foge do escopo desta dissertação, mas pode ser encontrada na bibliografia [9].

A principal diferença entre sistemas frustrados e sistemas que exibem ordem do tipo Néel está no comportamento da susceptibilidade magnética (χ) próximo à temperatura de Curie-Weiss, que na aproximação de campo médio satisfaz a relação aproximada $\Theta_{CW} \sim -zJS^2$ (z é o número de coordenação da rede, J é a intensidade da interação AF e S é o módulo do spin). Para um sistema sem frustração, χ exibe uma cúspide em $T_N \sim |\Theta_{CW}|$, que caracteriza o ordenamento Néel do sistema.

Para sistemas frustrados não há nenhum comportamento exótico em $T \sim |\Theta_{CW}|$ e a fase paramagnética se mantém por temperaturas muito abaixo dessas. Um ordenamento, ou “congelamento”, surge apenas para temperaturas quase duas ordens de grandeza menor que $|\Theta_{CW}|$, o que é típico de sistemas frustrados. O parâmetro $f = |\Theta_{CW}|/T_c$, sendo T_c

a temperatura real de “ordem”, é um parâmetro experimental importante para medir a frustração de compostos observados em laboratório.

Outros resultados experimentais de extrema importância, não só para sistemas frustrados, mas para todos os tipos de sistemas magnéticos, são aqueles fornecidos por espalhamento magnético de nêutrons. Para sistemas magnéticos não-frustrados a baixas temperaturas, uma medida de nêutrons revela picos de Bragg estreitos que caracterizam a ordem magnética, enquanto que para sistemas frustrados há um pico largo em um vetor de onda não-nulo, típico de interações AF de correlações de curto alcance. Além disso, a pequena seção de choque para vetores de onda próximos a zero mostra a ausência de correlações AF de longo alcance e correlações ferromagnéticas de curto alcance.

1.2.3 Redes *kagome* e estado de líquido de spin

Até agora expusemos características de sistemas geometricamente frustrados em geral, no entanto a riqueza de fenômenos emergentes de tais frustrações traz a necessidade de limitarmos a análises mais específicas à rede de nosso interesse. A rede *kagome* é uma estrutura bidimensional composta de bases triangulares em que cada vértice é vizinho de outros quatro, conforme exhibe a figura 1.5.

Em termos de estruturas de materias, essa estrutura pode aparecer em planos magnéticos ou na representação planar de uma série de compostos, no quais se destacam as jarositas, herbertsmititas, “blocos” de pirocloros (*pyrochlore slabs*), entre outros compostos. Outros exemplos interessantes ao nosso trabalho são materiais com elementos terras-raras que exibem comportamento de férmions pesados, mas estes serão comentados na próxima seção [9].

Os compostos citados acima apresentam uma fenomenologia diversificada, fortemente dependente da natureza dos momentos magnéticos (dada pelo módulo de S), os efeitos de anisotropia, da interação entre vizinhanças distantes, acoplamentos planares, etc. Apesar disso, em praticamente todos os casos, as flutuações de spin devidas à frustração geométrica estão presentes.

Um dos grandes desafios nesse tipo de sistema, tanto do ponto de vista teórico quanto experimental, é o estudo de um sistema *kagome* antiferromagnético “ideal”, que seria um

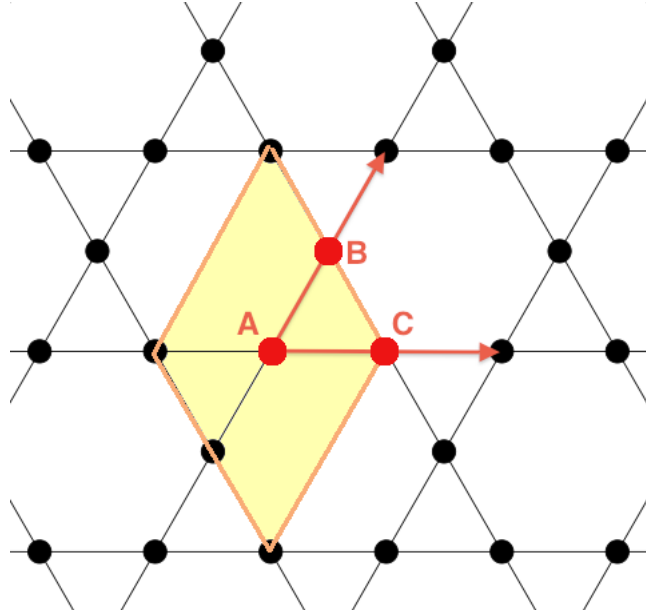


Figura 1.5: Estrutura *kagome*: célula primitiva (amarelo) e os vetores de rede (vermelho). Os três pontos, identificados por A, B e C, representam os sítios da base, que é um triângulo equilátero.

sistema com $S = 1/2$ e interações AF apenas de primeiros vizinhos. Estudos teóricos indicam que um sistema desse tipo é o mais provável candidato a ter uma fase magnética extremamente incomum, conhecida como *líquido de spin* [11].

Existem múltiplas definições de líquido de spin, mas aqui consideraremos como tal sistemas que não exibem correlações magnéticas de nenhuma ordem, ao contrário de um sistema ordenado (com magnetização, ou correlação de spin, não-nula) ou de um estado VBC (*valence bond crystal*) com correlação finita de dímeros. Uma descrição desse estado através da representação RVB de Anderson [12] resultaria em estados com pesos significativos em singletos de spins com grande separação espacial, o que interfere nas excitações magnéticas do sistema e eventualmente podem ser observados através de NMR ou espectroscopia de múons.

O problema da natureza do sistema *kagome* AF “ideal” ainda está em aberto e não iremos abordá-lo aqui. No Apêndice C há uma breve discussão sobre a natureza de um sistema clássico de spins (Heisenberg) e como ordens magnéticas são estabilizadas com outras interações.

1.3 Frustração em sistemas de elétrons itinerantes

Nas duas últimas seções descrevemos duas áreas da Física de Sistemas Fortemente Correlacionados que tipicamente encontram-se distantes uma da outra. O estudo de sistemas geometricamente frustrados normalmente é feito a partir de modelos de momentos magnéticos localizados, especialmente porque espera-se que a itinerância reduza os efeitos frustração, já que ela introduz interações de troca além das de primeiros vizinhos [13].

No entanto, existem alguns sistemas de férmions pesados em que a presença de frustração geométrica pode ocasionar comportamentos anômalos que não podem ser explicados por meio do diagrama de Doniach. O primeiro exemplo é o composto YbPtAl, que possui uma temperatura de Néel (T_N) quase independente de spin até a pressão $p \leq 11$ GPa, a partir da qual T_N cai rapidamente [14]. Acredita-se que essa anomalia seja resultado da formação de planos com estrutura triangular composta pelos íons de itérbio, juntamente com efeitos de campo cristalino.

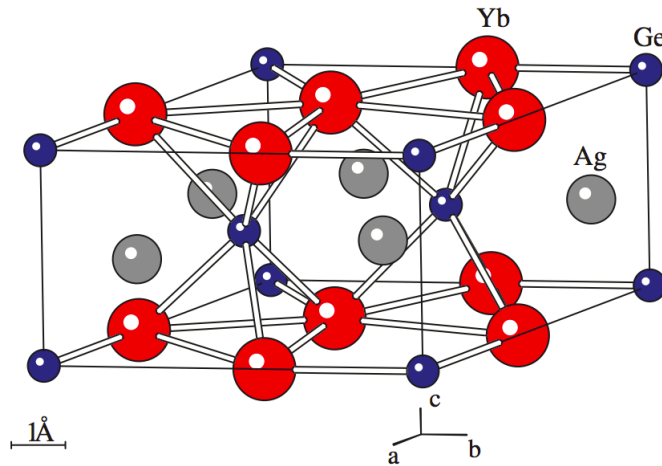


Figura 1.6: Estrutura cristalográfica do composto YbAgGe [15], onde os átomos de itérbio formam planos em uma estrutura *kagome*.

Um segundo composto de itérbio que apresenta propriedades magnéticas não-triviais é o YbGeAg [15–17]. Esse composto é um cristal do grupo espacial $P\bar{6}2m$ em que os íons Yb^{3+} formam uma estrutura *kagome* (figura 1.6). Compostos trivalentes de Yb, diferentemente dos de Ce exibidos na figura 1.2, têm o ordenamento magnético estabilizado pela pressão graças ao fato de terem configurações eletrônicas opostas, $4f^{13}$ e $4f^1$, respectivamente.

Não havendo transições estruturais com a aplicação de pressão, a frustração geométrica existente no plano basal está sempre presente e induz comportamentos anômalos nas propriedades magnéticas do material. À pressão ambiente existem duas transições magnéticas, em $T = 0,8 \text{ K}$ e $T = 0,65 \text{ K}$, e flutuações fortes de spin para temperaturas em uma ordem de grandeza maior, indicando a presença de frustração geométrica. Para $p = 0,5 \text{ GPa}$ as duas transições recaem em apenas uma ($T_m = 0,8 \text{ K}$), cuja temperatura de transição sofre um rápido aumento até alcançar seu máximo, $T_m = 5,4 \text{ K}$ para $p = 6,8 \text{ GPa}$, que ocorre pela passagem para um regime de momentos magnéticos estáveis.

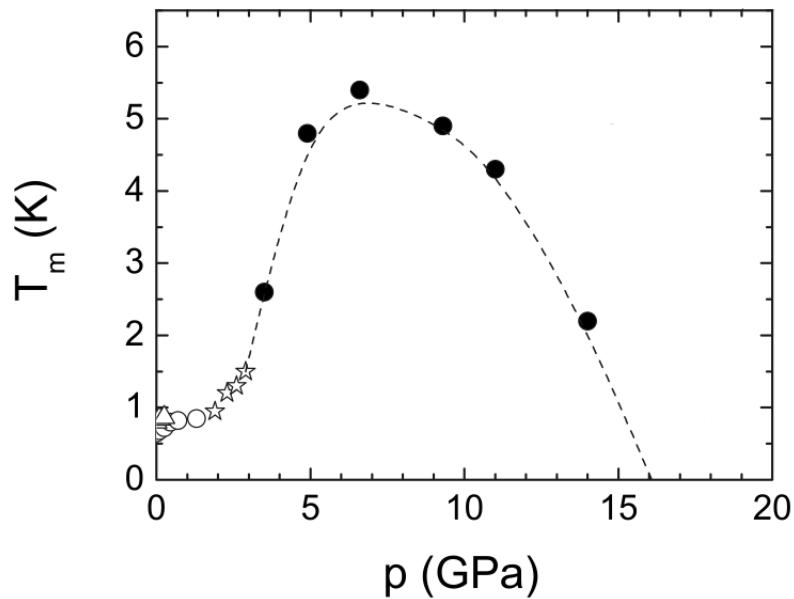


Figura 1.7: Variação da temperatura de ordem magnética em função da pressão para $YbAgGe$ [16]. Para pressões acima de 6 GPa a frustração geométrica passa a desestabilizar a fase ordenada, produzindo uma segunda transição no diagrama de fases deste sistema.

A formação de momentos magnéticos vem acompanhada da frustração geométrica, que acaba suprimindo rapidamente a ordem com o aumento de pressão. Com isso, observa-se que o sistema está próximo a dois pontos críticos quânticos. O primeiro, típico de sistemas de férmions pesados, está relacionado com a transição entre uma fase de momentos magnéticos blindados (nesse caso acompanhada de flutuações de spin relacionadas com a frustração) e uma fase ordenada. Para pressões altas há o aparecimento de um segundo ponto crítico referente ao desaparecimento da ordem por consequência da frustração.

Capítulo 2

O Modelo da rede de Kondo na rede *kagome*

O Modelo da rede de Kondo é descrito através do hamiltoniano:

$$\mathcal{H} = -t \sum_{i,j,\sigma} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + J_K \sum_i \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{s}_i + J_H \sum_{\langle ij \rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j + E_f \sum_{i\sigma} f_{i\sigma}^\dagger f_{i\sigma}. \quad (2.1)$$

O primeiro termo é de *tight-binding* que descreve os elétrons de condução do sistema, sendo $c_{i\sigma}^\dagger$ ($c_{i\sigma}$) o operador que cria (aniquila) um elétron de condução no sítio i com orientação de spin σ . O segundo termo refere-se ao acoplamento Kondo, em que há a interação de troca (de energia $J_K > 0$, portanto antiferromagnética) entre os elétrons itinerantes e localizados em um mesmo sítio. O terceiro termo é uma interação de troca entre elétrons localizados de sítios vizinhos (cuja energia é J_H). Esses operadores obedecem as regras usuais de anticomutação:

$$\begin{aligned} \{c_i; c_j^\dagger\} &= \delta_{i,j}, & \{f_i; f_j^\dagger\} &= \delta_{i,j}, \\ \{c_i; c_j\} &= \{c_i^\dagger; c_j^\dagger\} = 0, & \{f_i; f_j\} &= \{f_i^\dagger; f_j^\dagger\} = 0, \\ \{c_i; f_j\} &= \{c_i^\dagger; f_j^\dagger\} = \{c_i^\dagger; f_j\} = \{c_i; f_j^\dagger\} = 0. \end{aligned} \quad (2.2)$$

Em princípio há uma redundância na descrição do sistema através desse hamiltoniano, uma vez que a interação de troca dos elétrons localizados está contida na interação Kondo. Como iremos fazer uma aproximação de campo médio, as flutuações de spin serão negligenciadas e o segundo termo não será capaz de incluir correlações magnéticas intersítios,

justificando assim a inclusão de um termo de troca *ad hoc*. Para que o hamiltoniano em (2.1) seja equivalente ao apresentado na Introdução (eq. (1.5)), devemos considerar uma energia local E_f que nos assegure a condição de que cada sítio da rede esteja com um elétron f:

$$\frac{1}{N} \sum_{i\sigma} f_{i\sigma}^\dagger f_{i\sigma} = 1. \quad (2.3)$$

Antes de mais nada, adaptaremos a notação do hamiltoniano em (2.1) para levar em conta a existência de três sítios por célula primitiva que há na rede *kagome*. Iremos adotar uma notação de dois índices: letras romanas (i, j, \dots) e gregas (α, β, \dots) minúsculas. O primeiro determina em qual célula primitiva está o sítio em questão, ou seja, a qual triângulo da rede ele pertence. O segundo índice identifica o sítio dentro da base, isto é, determina para qual dos três sítios do triângulo (A, B ou C) a referência é feita. Além disso, definimos para todo triângulo i um segundo triângulo, adjacente à i no sítio A, denominado i' . Com ele podemos mapear todas as interações de dois operadores em triângulos distintos, por interações entre i e i' , desde que nos limitemos às interações de primeiros vizinhos.

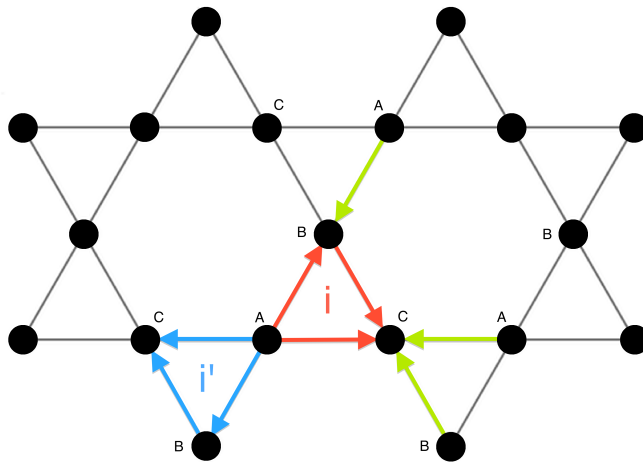


Figura 2.1: Rede *kagome* A partir dos vetores de *hopping* vermelhos e verdes, junto com as translações dos vetores de rede, são geradas todas as ligações que compõe a rede. Por operações de simetria os vetores verdes, que ligam sítios de bases diferentes, podem ser postos em um mesmo triângulo i' .

A figura 2.1 ilustra bem a notação que será empregada: a partir dos vetores de *hopping* vermelhos e verdes, junto com as translações dos vetores de rede (apresentados na

figura 1.5), geramos todas as ligações entre dois sítios, ou seja, todas as interações não-locais de nosso sistema. Os vetores verdes podem ser postos, através dos vetores de rede, em um mesmo triângulo que é adjacente ao triângulo i . Portanto nossa soma sobre primeiros vizinhos pode ser reescrita como uma soma sobre os triângulos i e uma soma (cujo índice será $\langle\alpha\beta\rangle$) sobre os vizinhos definidos pelos seis *hoppings* em vermelho e azul. Agora fica bastante simples tomar transformadas de Fourier através dessa notação.

Considerando uma rede *kagome* isotrópica, escolhemos $t_{ij} = t$ e $J_{ij} = J_H$ para quaisquer i e j que sejam primeiros vizinhos. Levando tais escolhas em consideração e utilizando a notação descrita acima, reescrevemos (2.1) como:

$$\mathcal{H} = -t \sum_{i, \langle\alpha\beta\rangle, \sigma} \left(c_{i\alpha\sigma}^\dagger c_{i\beta\sigma} + c_{i\beta\sigma}^\dagger c_{i\alpha\sigma} \right) + J_K \sum_{i\alpha} \mathbf{S}_{i\alpha} \cdot \mathbf{s}_{i\alpha} + J_H \sum_{i, \langle\alpha\beta\rangle} \mathbf{S}_{i\alpha} \cdot \mathbf{S}_{i\beta} + E_f \sum_{i\alpha\sigma} f_{i\alpha\sigma}^\dagger f_{i\alpha\sigma}. \quad (2.4)$$

Definida a notação, cabe agora escolhermos uma representação para os operadores de spin em termos de operadores de campo fermiônicos. Para tanto, lançamos mão da seguinte identidade:

$$\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2 = S_1^z S_2^z + \frac{1}{2} (S_1^+ S_2^- + S_1^- S_2^+). \quad (2.5)$$

A representação fermiônica escolhida é a usual,

$$\begin{aligned} S_i^z &= \frac{1}{2} (f_{i\uparrow}^\dagger f_{i\uparrow} - f_{i\downarrow}^\dagger f_{i\downarrow}), \\ S_i^+ &= f_{i\uparrow}^\dagger f_{i\downarrow}, \\ S_i^- &= f_{i\downarrow}^\dagger f_{i\uparrow}, \end{aligned} \quad (2.6)$$

equivalentes para \mathbf{s}_i , porém estes são escritos em termos de $c_{i\sigma}^\dagger$ e $c_{i\sigma}$. Utilizando estas relações em (2.4), temos:

$$\begin{aligned} \mathcal{H} &= -t \sum_{i, \langle\alpha\beta\rangle, \sigma} \left(c_{i\alpha\sigma}^\dagger c_{i\beta\sigma} + c_{i\beta\sigma}^\dagger c_{i\alpha\sigma} \right) + E_f \sum_{i\alpha\sigma} f_{i\alpha\sigma}^\dagger f_{i\alpha\sigma} \\ &+ J_K \sum_{i\alpha} \left(\frac{1}{4} (f_{i\uparrow}^\dagger f_{i\uparrow} - f_{i\downarrow}^\dagger f_{i\downarrow}) (c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\uparrow} - c_{i\downarrow}^\dagger c_{i\downarrow}) + \frac{1}{2} (f_{i\uparrow}^\dagger f_{i\downarrow} c_{i\downarrow}^\dagger c_{i\uparrow} + f_{i\downarrow}^\dagger f_{i\uparrow} c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\downarrow}) \right) \\ &+ J_H \sum_{i, \langle\alpha\beta\rangle} \left(\frac{1}{4} (f_{i\alpha\uparrow}^\dagger f_{i\alpha\uparrow} - f_{i\alpha\downarrow}^\dagger f_{i\alpha\downarrow}) (f_{i\beta\uparrow}^\dagger f_{i\beta\uparrow} - f_{i\beta\downarrow}^\dagger f_{i\beta\downarrow}) \right) \\ &+ J_H \sum_{i, \langle\alpha\beta\rangle} \left(\frac{1}{2} (f_{i\alpha\uparrow}^\dagger f_{i\alpha\downarrow} f_{i\beta\downarrow}^\dagger f_{i\beta\uparrow} + f_{i\alpha\downarrow}^\dagger f_{i\alpha\uparrow} f_{i\beta\uparrow}^\dagger f_{i\beta\downarrow}) \right). \end{aligned} \quad (2.7)$$

Este hamiltoniano contém termos de quatro operadores fermiônicos, também chamados termos de *duas partículas*, nos quais devemos aplicar a aproximação de campo médio com o intuito de transformá-los em termos de partícula única. Hamiltonianos de partícula única levam à equações de movimento para as Funções de Green lineares e acopladas, pois a comutação destes operadores com o hamiltoniano resulta em apenas um operador.

2.1 Bandas de condução

Antes de abordarmos a aproximação de campo médio, é conveniente conhecermos a natureza das bandas de condução da rede *kagome*. Primeiro devemos transformar os operadores de elétrons da representação de Wannier para a representação de Bloch através da relação:

$$c_{i\alpha}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_{i\alpha}} c_{\mathbf{k}\alpha}^\dagger. \quad (2.8)$$

Tomando a transformada de Fourier do primeiro termo em (2.1), rearranjando os argumentos das exponenciais e escrevendo em uma forma matricial, temos:

$$H = -2t \sum_{\mathbf{k}} \begin{pmatrix} c_{\mathbf{k}A}^\dagger & c_{\mathbf{k}B}^\dagger & c_{\mathbf{k}C}^\dagger \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & \cos(\mathbf{k}\cdot\delta_1) & \cos(\mathbf{k}\cdot\delta_2) \\ \cos(\mathbf{k}\cdot\delta_1) & 0 & \cos(\mathbf{k}\cdot(\delta_2 - \delta_1)) \\ \cos(\mathbf{k}\cdot\delta_2) & \cos(\mathbf{k}\cdot(\delta_2 - \delta_1)) & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{\mathbf{k}A} \\ c_{\mathbf{k}B} \\ c_{\mathbf{k}C} \end{pmatrix} \quad (2.9)$$

Os vetores δ_1 e δ_2 são vetores que indicam, em um mesmo triângulo i , a distância do sítio A até os sítios B e C, respectivamente. Logo,

$$\begin{aligned} \delta_1 &= \frac{a}{2}(\hat{i} + \sqrt{3}\hat{j}), \\ \delta_2 &= a\hat{i}. \end{aligned} \quad (2.10)$$

As três bandas de condução são dadas pela diagonalização da matriz 3×3 contida

em (2.9), que são:

$$\begin{aligned}\varepsilon_1(\mathbf{k}) &= -2t, \\ \varepsilon_2(\mathbf{k}) &= t \left(1 - \sqrt{3 + 2 \cos(\mathbf{k} \cdot \delta_1) + 2 \cos(\mathbf{k} \cdot \delta_2) \cos(\mathbf{k} \cdot (\delta_2 - \delta_1))} \right), \\ \varepsilon_3(\mathbf{k}) &= t \left(1 + \sqrt{3 + 2 \cos(\mathbf{k} \cdot \delta_1) + 2 \cos(\mathbf{k} \cdot \delta_2) \cos(\mathbf{k} \cdot (\delta_2 - \delta_1))} \right).\end{aligned}\quad (2.11)$$

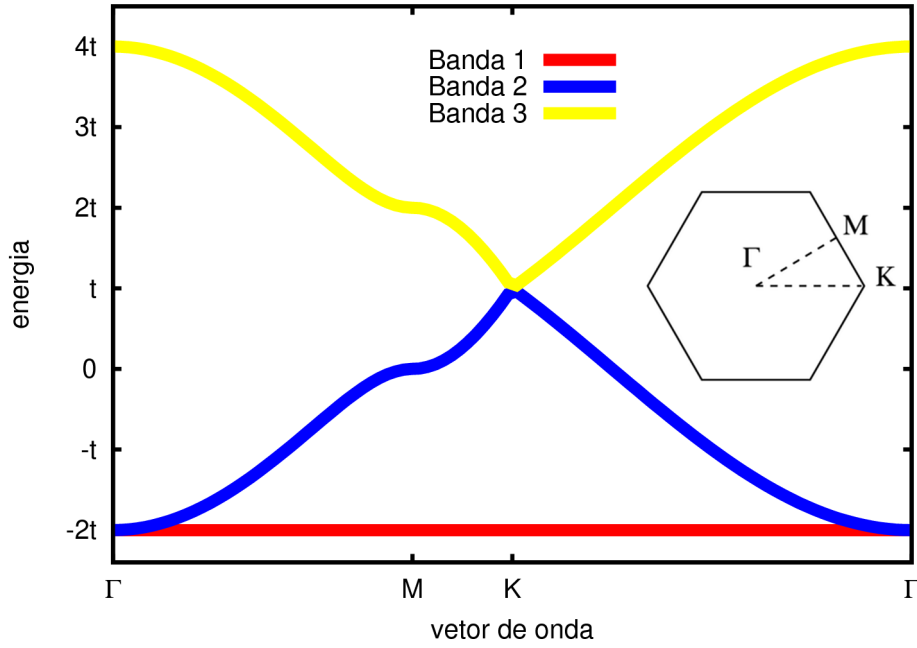


Figura 2.2: Bandas de condução da rede *kagome*. A banda de menor energia (vermelho) é não dispersiva, enquanto as demais apresentam uma largura $3t$ e são simétricas frente a uma reflexão em torno de $E = t$.

2.2 Aproximação de Campo Médio

Considerando que existem diferentes campos que podem ou não ser relevantes ao estudo de um dado sistema, existem diferentes abordagens de campo médio dependendo da natureza das fases a serem estudadas. Como queremos estudar a relação entre fases com correlações magnéticas e efeito Kondo, devemos conservar campos referentes a tais interações. Para o efeito Kondo é necessário manter o campo referente à hibridização local entre elétrons do tipo c e f ($\lambda = \langle c^\dagger f \rangle$) e as correlações locais dos elétrons f , que podem ser importantes

em fases não magnéticas [18], enquanto que para fases magnéticas precisamos conservar as magnetizações dos elétrons f e c .

Por questões de fluidez do texto não iremos apresentar aqui todos os detalhes da aplicação do campo médio em (2.7), mas escolhemos um termo como ilustração do método. Consideremos o seguinte termo proveniente do termo de Kondo:

$$\begin{aligned}
c_{i\alpha\uparrow}^\dagger c_{i\alpha\uparrow} f_{i\alpha\uparrow}^\dagger f_{i\alpha\uparrow} &\approx + \langle c_{i\alpha\uparrow}^\dagger c_{i\alpha\uparrow} \rangle f_{i\alpha\uparrow}^\dagger f_{i\alpha\uparrow} + \langle f_{i\alpha\uparrow}^\dagger f_{i\alpha\uparrow} \rangle c_{i\alpha\uparrow}^\dagger c_{i\alpha\uparrow} \\
&\quad - \langle c_{i\alpha\uparrow}^\dagger f_{i\alpha\uparrow} \rangle f_{i\alpha\uparrow}^\dagger c_{i\alpha\uparrow} - \langle f_{i\alpha\uparrow}^\dagger c_{i\alpha\uparrow} \rangle c_{i\alpha\uparrow}^\dagger f_{i\alpha\uparrow} \\
&\quad - \langle c_{i\alpha\uparrow}^\dagger c_{i\alpha\uparrow} \rangle \langle f_{i\alpha\uparrow}^\dagger f_{i\alpha\uparrow} \rangle + \langle c_{i\alpha\uparrow}^\dagger f_{i\alpha\uparrow} \rangle \langle f_{i\alpha\uparrow}^\dagger c_{i\alpha\uparrow} \rangle.
\end{aligned} \tag{2.12}$$

Este procedimento é feito para todos os termos do hamiltoniano que apresentam quatro operadores. Para o termo Kondo, desprezando os termos que são constantes, temos:

$$\begin{aligned}
\mathcal{H}_K &\approx J_K \sum_{i\alpha\sigma} \left[-\frac{1}{4} \left(\langle f_{i\alpha\sigma}^\dagger c_{i\alpha\sigma} \rangle c_{i\alpha\sigma}^\dagger f_{i\alpha\sigma} + \langle c_{i\alpha\sigma}^\dagger f_{i\alpha\sigma} \rangle f_{i\alpha\sigma}^\dagger c_{i\alpha\sigma} \right) \right. \\
&\quad \left. + \frac{1}{2} \sigma \left(\langle S_{i\alpha}^z \rangle c_{i\alpha\sigma}^\dagger c_{i\alpha\sigma} + \langle s_{i\alpha}^z \rangle f_{i\alpha\sigma}^\dagger f_{i\alpha\sigma} \right) - \frac{1}{2} \left(\langle f_{i\alpha\bar{\sigma}}^\dagger c_{i\alpha\bar{\sigma}} \rangle c_{i\alpha\sigma}^\dagger f_{i\alpha\sigma} + \langle c_{i\alpha\bar{\sigma}}^\dagger f_{i\alpha\bar{\sigma}} \rangle f_{i\alpha\sigma}^\dagger c_{i\alpha\sigma} \right) \right] \\
&= J_K \sum_{i\alpha\sigma} \left[-\frac{1}{2} \left(\lambda_{i\alpha\bar{\sigma}} + \frac{1}{2} \lambda_{i\alpha\sigma} \right) c_{i\alpha\sigma}^\dagger f_{i\alpha\sigma} - \frac{1}{2} \left(\lambda_{i\alpha\bar{\sigma}} + \frac{1}{2} \lambda_{i\alpha\sigma} \right) f_{i\alpha\sigma}^\dagger c_{i\alpha\sigma} \right. \\
&\quad \left. + \frac{\sigma}{2} \left(\langle S_{i\alpha}^z \rangle c_{i\alpha\sigma}^\dagger c_{i\alpha\sigma} + \langle s_{i\alpha}^z \rangle f_{i\alpha\sigma}^\dagger f_{i\alpha\sigma} \right) \right].
\end{aligned} \tag{2.13}$$

Para o termo Heisenberg:

$$\begin{aligned}
\mathcal{H}_H &\approx \frac{J_H}{2} \sum_{i,(\alpha\beta),\sigma} \left[- \left(\langle f_{i\beta\bar{\sigma}}^\dagger f_{i\alpha\bar{\sigma}} \rangle + \frac{1}{2} \langle f_{i\beta\sigma}^\dagger f_{i\alpha\sigma} \rangle \right) f_{i\alpha\sigma}^\dagger f_{i\beta\sigma} \right. \\
&\quad \left. + \sigma \left(\langle S_{i\alpha}^z \rangle f_{i\beta\sigma}^\dagger f_{i\beta\sigma} + \langle S_{i\beta}^z \rangle f_{i\alpha\sigma}^\dagger f_{i\alpha\sigma} \right) - \left(\langle f_{i\alpha\bar{\sigma}}^\dagger f_{i\beta\bar{\sigma}} \rangle + \frac{1}{2} \langle f_{i\alpha\sigma}^\dagger f_{i\beta\sigma} \rangle \right) f_{i\beta\sigma}^\dagger f_{i\alpha\sigma} \right] \\
&= \frac{J_H}{2} \sum_{i,(\alpha\beta),\sigma} \left[\sigma \left(\langle S_{i\alpha}^z \rangle f_{i\beta\sigma}^\dagger f_{i\beta\sigma} + \langle S_{i\beta}^z \rangle f_{i\alpha\sigma}^\dagger f_{i\alpha\sigma} \right) \right. \\
&\quad \left. - \left(\Gamma_{i\alpha,i\beta}^{\bar{\sigma}} + \frac{1}{2} \Gamma_{i\alpha,i\beta}^{\sigma} \right) \left(f_{i\alpha\sigma}^\dagger f_{i\beta\sigma} + f_{i\beta\sigma}^\dagger f_{i\alpha\sigma} \right) \right].
\end{aligned} \tag{2.14}$$

Aqui utilizamos as definições das médias do campo médio ¹, já considerando a invariância translacional:

$$\begin{aligned}
\langle S_\alpha^z \rangle &\equiv \frac{1}{2} \left(\langle f_{i\alpha\uparrow}^\dagger f_{i\alpha\uparrow} \rangle - \langle f_{i\alpha\downarrow}^\dagger f_{i\alpha\downarrow} \rangle \right), \\
\langle s_\alpha^z \rangle &\equiv \frac{1}{2} \left(\langle c_{i\alpha\uparrow}^\dagger c_{i\alpha\uparrow} \rangle - \langle c_{i\alpha\downarrow}^\dagger c_{i\alpha\downarrow} \rangle \right), \\
\lambda_{\alpha\sigma} &\equiv \langle f_{i\alpha\sigma}^\dagger c_{i\alpha\sigma} \rangle \quad \text{e} \\
\Gamma_{\alpha,\beta}^\sigma &\equiv \langle f_{i\alpha\sigma}^\dagger f_{i\beta\sigma} \rangle.
\end{aligned} \tag{2.15}$$

Podemos escrever ainda [19]

$$\begin{aligned}
\mathcal{H}_{MF} = & -t \sum_{i,(\alpha\beta),\sigma} \left(c_{i\alpha\sigma}^\dagger c_{i\beta\sigma} + c_{i\beta\sigma}^\dagger c_{i\alpha\sigma} \right) + \sum_{i\alpha\sigma} \epsilon_{\alpha\sigma}^c c_{i\alpha\sigma}^\dagger c_{i\alpha\sigma} + \sum_{i\alpha\sigma} \epsilon_{\alpha\sigma}^f f_{i\alpha\sigma}^\dagger f_{i\alpha\sigma} \\
& - \sum_{i\alpha\sigma} \tilde{V}_{\alpha\sigma} \left(c_{i\alpha\sigma}^\dagger f_{i\alpha\sigma} + f_{i\alpha\sigma}^\dagger c_{i\alpha\sigma} \right) - \sum_{i,(\alpha\beta),\sigma} \tilde{t}_{\alpha\beta}^\sigma \left(f_{i\alpha\sigma}^\dagger f_{i\beta\sigma} + f_{i\beta\sigma}^\dagger f_{i\alpha\sigma} \right),
\end{aligned} \tag{2.16}$$

onde definimos:

$$\begin{aligned}
\epsilon_{\alpha\sigma}^c &\equiv \sigma h_\alpha^f \equiv \sigma \frac{J_K}{2} \langle S_\alpha^z \rangle, \\
\epsilon_{\alpha\sigma}^f &\equiv E_f + \sigma (h_\alpha^c + \eta_\alpha) = E_f + \frac{\sigma}{2} \left(J_K \langle s_\alpha^z \rangle + J_H \sum_{\beta \neq \alpha} \langle S_\beta^z \rangle \right), \\
\tilde{V}_{\alpha\sigma} &\equiv \frac{J_K}{2} \left(\lambda_{\alpha\bar{\sigma}} + \frac{1}{2} \lambda_{\alpha\sigma} \right), \\
\tilde{t}_{\alpha\beta}^\sigma &\equiv \frac{J_H}{2} \left(\Gamma_{\alpha\beta}^{\bar{\sigma}} + \frac{1}{2} \Gamma_{\alpha\beta}^\sigma \right).
\end{aligned} \tag{2.17}$$

Observamos aqui a simetria entre elétrons c e f existentes nesse hamiltoniano, já que nele temos termos de *hopping* e energias locais para ambos os tipos de elétrons, além da hibridização entre estes. O problema agora pode ser resolvido mais facilmente por termos um hamiltoniano de partícula única. Poderíamos, por exemplo, fazer uma diagonalização exata deste, montando as autofunções e autoenergias para subespaços com diferentes números de elétrons. Sendo necessário, tanto aqui como em quaisquer problemas em que a aproximação de campo médio seja considerada, o cálculo autoconsistente das médias definidas em (2.15), optamos por calcular as funções de Green do problema. Tendo essas funções, podemos usá-las diretamente para o cálculo das médias através de métodos bem conhecidos (ver Apêndice B).

¹Pelo fato do hamiltoniano ser hermitiano, temos as relações $\lambda_{i\alpha\sigma} = \lambda_{i\alpha\sigma}^*$ e $\Gamma_{\beta,\alpha}^\sigma = \Gamma_{\alpha,\beta}^\sigma$

2.3 Funções de Green

Seja $G_{A;B}(\omega) \equiv \langle\langle A; B \rangle\rangle$ a função de Green de Matsubara de dois operadores fermiônicos quaisquer. A equação de movimento para esta função de Green é:

$$-\omega G_{A;B} = \langle\{A, B\}\rangle + G_{[\mathcal{H},A];B}. \quad (2.18)$$

A partir dos comutadores dos operadores com o hamiltoniano de (2.16),

$$\begin{aligned} [\mathcal{H}; c_{i\gamma\sigma'}] &= t \left(\sum_{\gamma \neq \beta} c_{i\beta\gamma'} + \sum_{\gamma \neq \alpha} c_{i\alpha\sigma'} \right) - \epsilon_{\gamma\sigma'}^c c_{i\gamma\sigma'} + \tilde{V}_{\gamma\sigma'} f_{i\gamma\sigma'} \quad \text{e} \\ [\mathcal{H}; f_{i\gamma\sigma'}] &= \left(\sum_{\gamma \neq \beta} \tilde{t}_{\gamma\beta}^{\sigma'} f_{i\beta\gamma'} + \sum_{\gamma \neq \alpha} \tilde{t}_{\alpha\gamma}^{\sigma'} f_{i\alpha\sigma'} \right) - \epsilon_{\gamma\sigma'}^f f_{i\gamma\sigma'} + \tilde{V}_{\gamma\sigma'} c_{i\gamma\sigma'}, \end{aligned} \quad (2.19)$$

construímos o conjunto de equações acopladas das funções de Green:

$$\begin{aligned} (\epsilon_{\gamma\sigma}^c - \omega) G_{\gamma\nu}^{cc} - 2t \sum_{\alpha \neq \gamma} \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_{\alpha\gamma}) G_{\alpha\nu}^{cc} &= \delta_{\gamma\nu} + \tilde{V}_{\gamma\sigma} G_{\gamma\nu}^{fc}, \\ (\epsilon_{\gamma\sigma}^f - \omega) G_{\gamma\nu}^{fc} - 2 \sum_{\alpha \neq \gamma} \tilde{t}_{\alpha\gamma}^{\sigma} \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_{\alpha\gamma}) G_{\alpha\nu}^{fc} &= \tilde{V}_{\gamma\sigma} G_{\gamma\nu}^{cc}, \\ (\epsilon_{\gamma\sigma}^f - \omega) G_{\gamma\nu}^{ff} - 2 \sum_{\alpha \neq \gamma} \tilde{t}_{\alpha\gamma}^{\sigma} \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_{\alpha\gamma}) G_{\alpha\nu}^{ff} &= \delta_{\gamma\nu} + \tilde{V}_{\gamma\sigma} G_{\gamma\nu}^{cf} \quad \text{e} \\ (\epsilon_{\gamma\sigma}^f - \omega) G_{\gamma\nu}^{cf} - 2t \sum_{\alpha \neq \gamma} \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_{\alpha\gamma}) G_{\alpha\nu}^{cf} &= \tilde{V}_{\gamma\sigma} G_{\gamma\nu}^{ff}. \end{aligned} \quad (2.20)$$

Tais equações podem, por simplicidade, ser escritas em termos de equações matriciais:

$$\begin{aligned} \mathbf{C}_\sigma \mathbf{G}_\sigma^{cc} &= \mathbf{I} + \mathbf{V}_\sigma \mathbf{G}_\sigma^{fc}, \\ \mathbf{F}_\sigma \mathbf{G}_\sigma^{fc} &= \mathbf{V}_\sigma \mathbf{G}_\sigma^{cc}, \\ \mathbf{F}_\sigma \mathbf{G}_\sigma^{ff} &= \mathbf{I} + \mathbf{V}_\sigma \mathbf{G}_\sigma^{cf} \quad \text{e} \\ \mathbf{C}_\sigma \mathbf{G}_\sigma^{cf} &= \mathbf{V}_\sigma \mathbf{G}_\sigma^{ff}. \end{aligned} \quad (2.21)$$

onde \mathbb{I} é a matriz identidade, e \mathbb{C} , \mathbb{F} e \mathbb{V} são:

$$\begin{aligned} \mathbb{C}_\sigma &= \begin{pmatrix} \epsilon_{A\sigma}^c - \omega & -2t \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_{AB}) & -2t \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_{AC}) \\ -2t \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_{AB}) & \epsilon_{B\sigma}^c - \omega & -2t \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_{BC}) \\ -2t \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_{AC}) & -2t \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_{BC}) & \epsilon_{C\sigma}^c - \omega \end{pmatrix}, \\ \mathbb{F}_\sigma &= \begin{pmatrix} \epsilon_{A\sigma}^f - \omega & -2\tilde{t}_{AB}^\sigma \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_{AB}) & -2\tilde{t}_{AC}^\sigma \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_{AC}) \\ -2\tilde{t}_{AB}^\sigma \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_{AB}) & \epsilon_{B\sigma}^f - \omega & -2\tilde{t}_{BC}^\sigma \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_{BC}) \\ -2\tilde{t}_{AC}^\sigma \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_{AC}) & -2\tilde{t}_{BC}^\sigma \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_{BC}) & \epsilon_{C\sigma}^f - \omega \end{pmatrix} \quad \text{e} \quad (2.22) \\ \mathbb{V}_\sigma &= \begin{pmatrix} \tilde{V}_{A\sigma} & 0 & 0 \\ 0 & \tilde{V}_{B\sigma} & 0 \\ 0 & 0 & \tilde{V}_{C\sigma} \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Finalmente, as funções de Green desse sistema, na forma matricial são:

$$\begin{aligned} \mathbb{G}_\sigma^{cc} &= (\mathbb{C}_\sigma - \mathbb{V}\mathbb{F}_\sigma^{-1}\mathbb{V}_\sigma)^{-1}, \\ \mathbb{G}_\sigma^{fc} &= (\mathbb{C}_\sigma\mathbb{V}_\sigma^{-1}\mathbb{F}_\sigma - \mathbb{V}_\sigma)^{-1}, \\ \mathbb{G}_\sigma^{ff} &= (\mathbb{F}_\sigma - \mathbb{V}\mathbb{C}_\sigma^{-1}\mathbb{V}_\sigma)^{-1} \quad \text{e} \\ \mathbb{G}_\sigma^{cf} &= (\mathbb{F}_\sigma\mathbb{V}_\sigma^{-1}\mathbb{C}_\sigma - \mathbb{V}_\sigma)^{-1}. \end{aligned} \quad (2.23)$$

Podemos observar a complexidade das matrizes que representam as funções de Green, dado que os elementos destas são, em princípio, frações de polinômios de sexto grau nos denominadores. Isto ocorre porque os pólos da função de Green de Matsubara são as energias dos elétrons do sistema, portanto como há seis estados nesse caso (três de cada tipo, mas dependentes por conta da hibridização), o denominador deve conter seis raízes reais.

Nas próximas seções discutiremos duas situações distintas para o problema: o caso não magnético e caso magnético. No primeiro caso iremos desprezar o termo de troca entre elétrons localizados ($J_H = 0$), o que nos limita ao estudo do efeito Kondo apenas. No segundo iremos propor uma aproximação simples para tratarmos do problema da frustração, na qual teremos que considerar uma quebra de simetria do sistema.

Capítulo 3

Caso Não Magnético

Neste capítulo iremos apresentar a primeira aproximação para o problema da rede de Kondo em uma estrutura *kagome*, denominada aproximação não magnética. Essa aproximação consiste simplesmente em supormos que a interação de troca entre elétrons f é pequena e pode ser desprezada. Lembrando que esta foi posta à mão para incluir interações de troca de primeiros vizinhos ao sistema provenientes de termos de mais alta ordem do acoplamento Kondo.

O termo de energia cinética dos elétrons c (*tight-binding*) não é dependente de spin e o termo Kondo possui simetria $SU(2)$, logo não deveríamos ter uma quebra de simetria de spin apenas com esses termos. Então se tomarmos $J_H = 0$, podemos considerar o caso em que há tal simetria e desprezar as magnetizações do sistema. Com isso o hamiltoniano (2.16) fica¹:

$$\mathcal{H}_{MF} = -t \sum_{i \neq \beta} \left(c_{i\alpha}^\dagger c_{i\beta} + c_{i\beta}^\dagger c_{i\alpha} \right) + E_f \sum_{i\alpha} f_{i\alpha}^\dagger f_{i\alpha} - \sum_{i\alpha} \tilde{V} \left(c_{i\alpha}^\dagger f_{i\alpha} + f_{i\alpha}^\dagger c_{i\alpha} \right). \quad (3.1)$$

Aqui observamos que,

$$\tilde{V} = \frac{3}{4} J_K \lambda, \quad (3.2)$$

por conta da simetria de spin e da simetria entre os três sítios da rede, proveniente da ausência de correlações magnéticas e da simetria $SU(2)$ do hamiltoniano de Kondo.

¹Nesse capítulo não colocaremos explicitamente a dependência de spin por conta da simetria entre spins *up* e *down*

3.1 Funções de Green

Para o hamiltoniano (3.1), as matrizes envolvidas no sistema de equações matriciais para as funções de Green são mais simples:

$$\begin{aligned} \mathbb{V} &= \tilde{V}\mathbb{I} \\ \mathbb{F} &= (E_f - \omega)\mathbb{I} \\ \mathbb{C} &= \begin{pmatrix} -\omega & -2t \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_{AB}) & -2t \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_{AC}) \\ -2t \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_{AB}) & -\omega & -2t \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_{BC}) \\ -2t \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_{AC}) & -2t \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_{BC}) & -\omega \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (3.3)$$

Definindo as funções:

$$\begin{aligned} b(\mathbf{k}) &\equiv 2 \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_{AB}) = 2 \cos\left(\frac{k_x}{2} + \sqrt{3}\frac{k_y}{2}\right), \\ c(\mathbf{k}) &\equiv 2 \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_{AC}) = 2 \cos(k_x), \\ d(\mathbf{k}) &\equiv 2 \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_{BC}) = 2 \cos\left(\frac{k_x}{2} - \sqrt{3}\frac{k_y}{2}\right), \\ \text{e } \Delta^2(\mathbf{k}) &\equiv b^2(\mathbf{k}) + c^2(\mathbf{k}) + d^2(\mathbf{k}). \end{aligned} \quad (3.4)$$

Com estas simplificações conseguimos fazer as operações matriciais necessárias para resolver o sistema (2.20):

$$\begin{aligned} G_{TOT}^{cc} &= Tr\mathbb{G}^{cc} = \frac{1}{D(\omega)} (E_f - \omega) \left(3 \left(\tilde{V}^2 + (E_f - \omega)\omega \right)^2 - \Delta^2 t^2 (E_f - \omega) \tilde{V}^2 \right), \\ G_{TOT}^{ff} &= Tr\mathbb{G}^{ff} = \frac{1}{D(\omega)} \left[6bcdt^3 (E_f - \omega)^3 + 3t^2 \Delta^2 (E_f - \omega) \left(\tilde{V}^2 + (E_f - \omega)\omega \right) \right. \\ &\quad \left. - 3 \left(\tilde{V}^2 + (E_f - \omega)\omega \right)^3 \omega - \Delta^2 t^2 (E_f - \omega) \tilde{V}^2 \right], \\ \text{e } G_{TOT}^{fc} &= G_{TOT}^{cf} = Tr\mathbb{G}^{cf} = \frac{1}{D(\omega)} \tilde{V} \left(3 \left(\tilde{V}^2 + (E_f - \omega)\omega \right)^2 - \Delta^2 t^2 (E_f - \omega)^2 \right). \end{aligned} \quad (3.5)$$

Os denominadores das três funções de Green são idênticos, portanto pudemos defini-los como uma única função $D(\omega)$:

$$D(\omega) \equiv \left(\tilde{V}^2 + (E_f - \omega)\omega \right)^2 - \Delta^2 t^2 (E_f - \omega)^2 \left(\tilde{V}^2 + (E_f - \omega)\omega \right) - 2bcdt^3 (E_f - \omega)^3. \quad (3.6)$$

Utilizando a relação trigonométrica

$$\Delta^2(\mathbf{k}) = b(\mathbf{k})c(\mathbf{k})d(\mathbf{k}) + 4 \quad (3.7)$$

podemos escrever (3.6) como:

$$D(\omega) = \left[\left(\tilde{V}^2 + (E_f - \omega) \omega \right) \left(\tilde{V}^2 + (E_f - \omega) (\omega - 2t) \right) - bcdt^2 (E_f - \omega)^2 \right] \times \left(\tilde{V}^2 + (E_f - \omega) (\omega + 2t) \right). \quad (3.8)$$

Este polinômio possui seis raízes distintas que podem ser escritas em função das energias das bandas (ver eq. (2.11)):

$$\omega_i^\pm \equiv \frac{E_f + \varepsilon_i}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{E_f - \varepsilon_i}{2} \right)^2 + \tilde{V}^2}, \quad i = 1, 2, 3 \quad (3.9)$$

Observamos que no limite sem interação ($\tilde{V} = 0$) as energias recaem nas três bandas oriundas do *tight-binding* e em três níveis localizados com energia E_f .

Uma vez conhecidas as energias dos elétrons do sistema, podemos calcular agora as funções espectrais referente a estas energias para cada função de Green. A função espectral é basicamente a contribuição de cada energia na densidade de estados para um dado vetor \mathbf{k} , então estas quantidades são fundamentais para os cálculos de números de ocupação (ver Apêndice B.2).

A decomposição em frações parciais das três funções de Green, juntamente com as funções espectrais, é:

$$\begin{aligned} G_{TOT}^{cc}(\mathbf{k}, \omega) &= \sum_{\substack{i=1,2,3 \\ \alpha=+,-}} \frac{A_i^\alpha(\mathbf{k})}{\omega - \omega_i^\alpha} \quad \Longrightarrow \quad A_i^\alpha(\mathbf{k}) = \left(\frac{E_f - \omega_i^\alpha}{\omega_i^\alpha - \omega_i^{\bar{\alpha}}} \right) P_i(\mathbf{k}), \\ G_{TOT}^{ff}(\mathbf{k}, \omega) &= \sum_{\substack{i=1,2,3 \\ \alpha=+,-}} \frac{F_i^\alpha(\mathbf{k})}{\omega - \omega_i^\alpha} \quad \Longrightarrow \quad F_i^\alpha(\mathbf{k}) = \left(\frac{\varepsilon_i - \omega_i^\alpha}{\omega_i^\alpha - \omega_i^{\bar{\alpha}}} \right) P_i(\mathbf{k}) \quad \text{e} \\ G_{TOT}^{fc}(\mathbf{k}, \omega) &= \sum_{\substack{i=1,2,3 \\ \alpha=+,-}} \frac{D_i^\alpha(\mathbf{k})}{\omega - \omega_i^\alpha} \quad \Longrightarrow \quad D_i^\alpha(\mathbf{k}) = \left(\frac{V}{\omega_i^\alpha - \omega_i^{\bar{\alpha}}} \right) P_i(\mathbf{k}). \end{aligned} \quad (3.10)$$

As funções espectrais dependem de uma função P_i , definida como ²:

$$P_i(\mathbf{k}) = \frac{3\varepsilon_i^2 - \Delta^2 t^2}{(\varepsilon_i - \varepsilon_j)(\varepsilon_k - \varepsilon_i)}. \quad (3.11)$$

A partir das Funções de Green em (3.10) é possível encontrar os parâmetros autoconsistentes do problema. A determinação de λ se dá através do cálculo do número de ocupação,

²Nessa definição (i, j, k) são índices cíclicos.

obtido a partir de uma integral da Função de Green mista G_{TOT}^{fc} :

$$\lambda = \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega n_F(\omega) \left(-\frac{1}{\pi} \sum_{\mathbf{k}} \Im \left(G_{TOT}^{fc}(\mathbf{k}, \omega) \right) \right) \quad (3.12)$$

Naturalmente o potencial químico (μ) e a energia dos níveis localizados (E_f) também precisam ser obtidos dessa forma. Estes são calculados indiretamente a partir dos vínculos:

$$n_f = \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega n_F(\omega) \left(-\frac{1}{\pi} \sum_{\mathbf{k}} \Im \left(G_{TOT}^{ff}(\mathbf{k}, \omega) \right) \right) \quad (3.13)$$

$$n_c = \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega n_F(\omega) \left(-\frac{1}{\pi} \sum_{\mathbf{k}} \Im \left(G_{TOT}^{cc}(\mathbf{k}, \omega) \right) \right) \quad (3.14)$$

O vínculo sobre os elétrons f é determinado pela condição de termos em média um elétron por nível localizado, que garante que o limite $U \rightarrow \infty$ esteja presente. Considerando que cabem 3 elétrons por spin em cada triângulo da base (note que as Funções de Green são relativas aos três sítios), devemos exigir $n_f = 1,5$ por spin.³ Para os elétrons c devemos fixar uma ocupação n_c como um parâmetro externo, tomando cuidado para não escolher valores próximos ou abaixo de $n_c = 1$, tendo em vista que esta é a região da banda não-dispersiva.

3.2 Resultados

Nessa seção iremos apresentar os resultados obtidos para o caso não magnético. Para os cálculos autoconsistentes desse capítulo utilizamos os métodos numéricos desenvolvidos nos Apêndices A e B. As figuras apresentadas foram produzidas através de cálculos pelo método desenvolvido na seção B.1, mas não diferem dos resultados obtidos utilizando a soma sobre frequências de Matsubara.

³O problema é independente de spin, então consideraremos todas ocupações como as de uma orientação de spin apenas.

3.2.1 Efeito da hibridização nas bandas

O primeiro resultado que iremos apresentar diz respeito ao comportamento das energias eletrônicas de acordo com a intensidade da hibridização entre os elétrons c e f . Como sabemos, o mecanismo de blindagem dos momentos magnéticos proveniente do efeito Kondo altera significativamente o comportamento dos níveis localizados. Em sistemas de redes de Kondo uma das modificações mais relevantes é o aparecimento de uma pequena largura de banda em tais níveis, o que dá aos elétrons f uma itinerância reduzida. Com isso, a massa efetiva de tais elétrons é muito grande, caracterizando o comportamento de férmions pesados conforme discutido na Introdução.

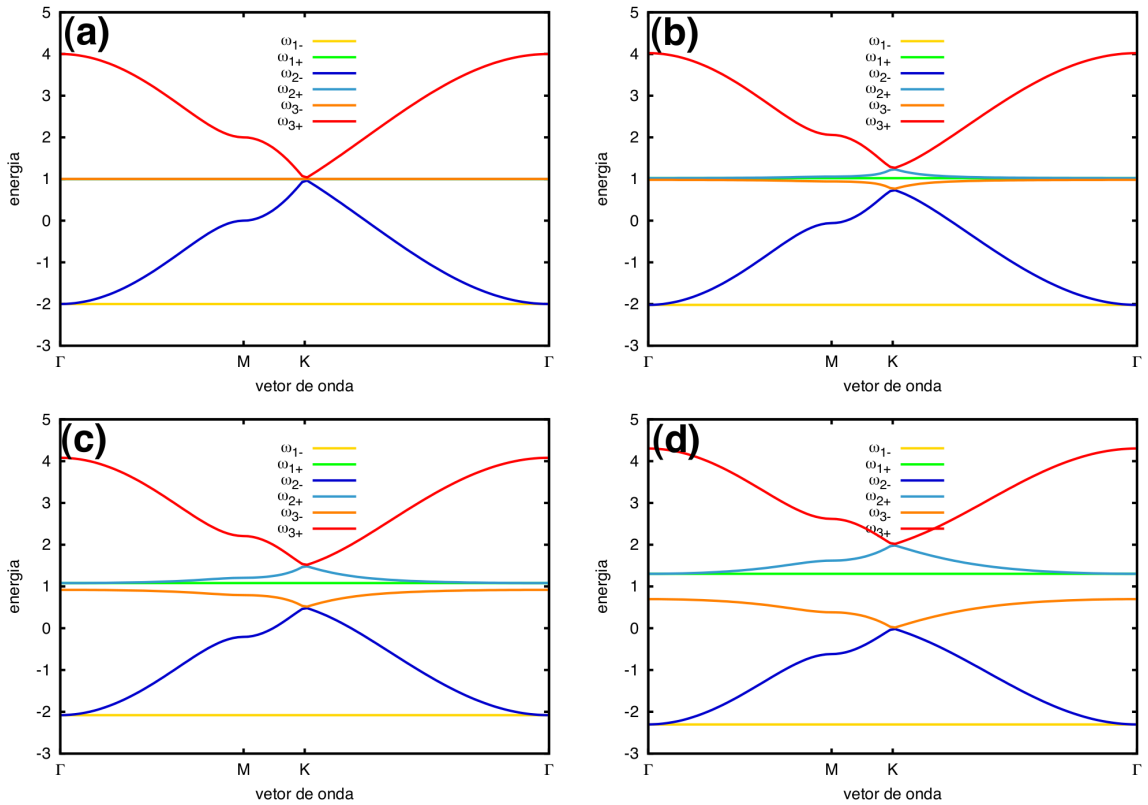


Figura 3.1: Diagrama de bandas para $E_f = 1$ e quatro valores de \tilde{V} : (a) $\tilde{V} = 0$, (b) $\tilde{V} = 0.25$, (c) $\tilde{V} = 0.5$ e (d) $\tilde{V} = 1$. Com o aumento de \tilde{V} , abre-se um gap em E_f e os três níveis f hibridizam com as bandas dos elétrons de condução.

A figura 3.1 exhibe o comportamento das bandas em função do parâmetro de hibridização, \tilde{V} , dada uma energia do nível f fixa. Para $\tilde{V} = 0$ temos as três bandas provenientes

do tight-binding, sendo uma delas plana, e três níveis f localizados. Quando $\tilde{V} \neq 0$, há o aparecimento de um gap na região do nível f . Além disso, os três níveis localizados adquirem parte do comportamento itinerante das bandas, exibindo uma largura de banda tipicamente menor que a dos elétrons c , a exceção de um dos níveis que permanece localizado por questões de simetria. Vale salientar que a largura de banda, bem como o tamanho do gap, são proporcionais à hibridização conforme esperado.

Se imaginarmos as possíveis posições do potencial químico, podemos verificar a riqueza do comportamento desse sistema. Para $\tilde{V} = 0$, o sistema é um metal quando o potencial químico se encontra em uma das duas bandas superiores, exceto para a região em que essas bandas se tocam. Nesse caso o comportamento é semimetálico, similar ao que acontece na região de dispersão linear do grafeno [20].

No caso de $\tilde{V} \neq 0$, um comportamento típico de redes de Kondo aparece e o sistema pode estar em fases mais interessantes que a fase metálica convencional. Se o potencial químico estiver em uma das bandas muito estreitas, o sistema pode ser considerado um férmion pesado, conforme discutido no início dessa subseção. Por outro lado, se o potencial químico está no gap, o sistema é um isolante de Kondo.

Naturalmente a escolha da posição do potencial químico não é arbitrária, então o aparecimento ou não das fases citadas acima dependem, no nosso caso, do resultado de cálculos autoconsistentes. Estes serão apresentados na próxima subseção.

3.2.2 Cálculos autoconsistentes

Para encontrarmos um diagrama de fases teórico a partir do hamiltoniano efetivo (3.1), precisamos resolver as equações autoconsistentes que determinam os parâmetros de campo médio do problema. Ao eliminarmos o magnetismo do problema, o único parâmetro de campo médio a ser determinado é λ e isso simplifica bastante o cálculo.

As possíveis fases do sistema são determinadas pelo valor de λ para diferentes valores de J_K , n_c e T . Se $\lambda = 0$, então não há hibridização entre elétrons c e f e os momentos magnéticos estão livres, logo chamaremos essa fase de paramagnética. Aqui o sistema deve ter um comportamento metálico, desde que $n_c \neq 2$, uma vez que para esse valor especial o

sistema é semimetálico.

Para $\lambda \neq 0$ ⁴ dizemos que o sistema está em uma fase Kondo: há a abertura de um gap na região do potencial químico entre bandas de pequena dispersão, associada a itinerância dos elétrons f dada pela hibridização.

Na figura 3.2 vemos o comportamento de λ em função da temperatura e J_K para diferentes valores de n_c . Para temperaturas acima de $T = 1$ o sistema está na fase paramagnética para $J_K \leq 5$. Para temperaturas menores o comportamento de λ é dependente de temperatura e há duas regiões diferentes no mapa de cores. A região Kondo, em tonalidades distintas de laranja, é separada da fase paramagnética por uma região crítica quase linear. O valor assintótico de J_K para baixas temperaturas reside entre 1,5 e 3, dependendo do valor de n_c . O preenchimento de banda também influencia na extensão e intensidade da região Kondo, uma vez que tais quantidades se reduzem ao aumentar n_c [21] quando este está acima do semipreenchido. A transição entre as fases define a temperatura de Kondo do sistema, logo podemos comparar qualitativamente a tendência das regiões em roxo na figura 3.2 com o valor de T_K para o caso de uma impureza (eq. (1.3)). A curva de $J_K \times T_K$ tem comportamento logarítmico para valores pequenos de T_K , que é bastante similar ao das curvas roxas, especialmente para ocupações grandes.

A figura 3.3 exhibe o comportamento de λ em função de n_c para uma temperatura $T = 0.1$ e diferentes valores de J_K . Para os maiores valores de J_K é observado um máximo em λ na região do semipreenchimento $n_c = 1.5$, o que é surpreendente pois coincide com resultados obtidos para bandas com simetria elétron-buraco. Salienta-se que tais resultados não estão relacionados com aspectos de simetria de bandas.

Um segundo resultado interessante é a curva $J_K = 3$: ela exhibe um máximo próximo dos menores valores de n_c , diminui drasticamente até atingir um mínimo em $n_c = 2$ e depois volta a crescer, mantendo um comportamento parecido com as demais curvas, com $J_K > 3$. O mínimo em $n_c = 2$, ao contrário do máximo no semipreenchimento, é consequência direta das simetrias. Para essa ocupação, o potencial químico deve estar muito próximo a 1, que

⁴A determinação da condição numérica $\lambda \neq 0$ deve ser adequada com a margem de erro do cálculo autoconsistente.

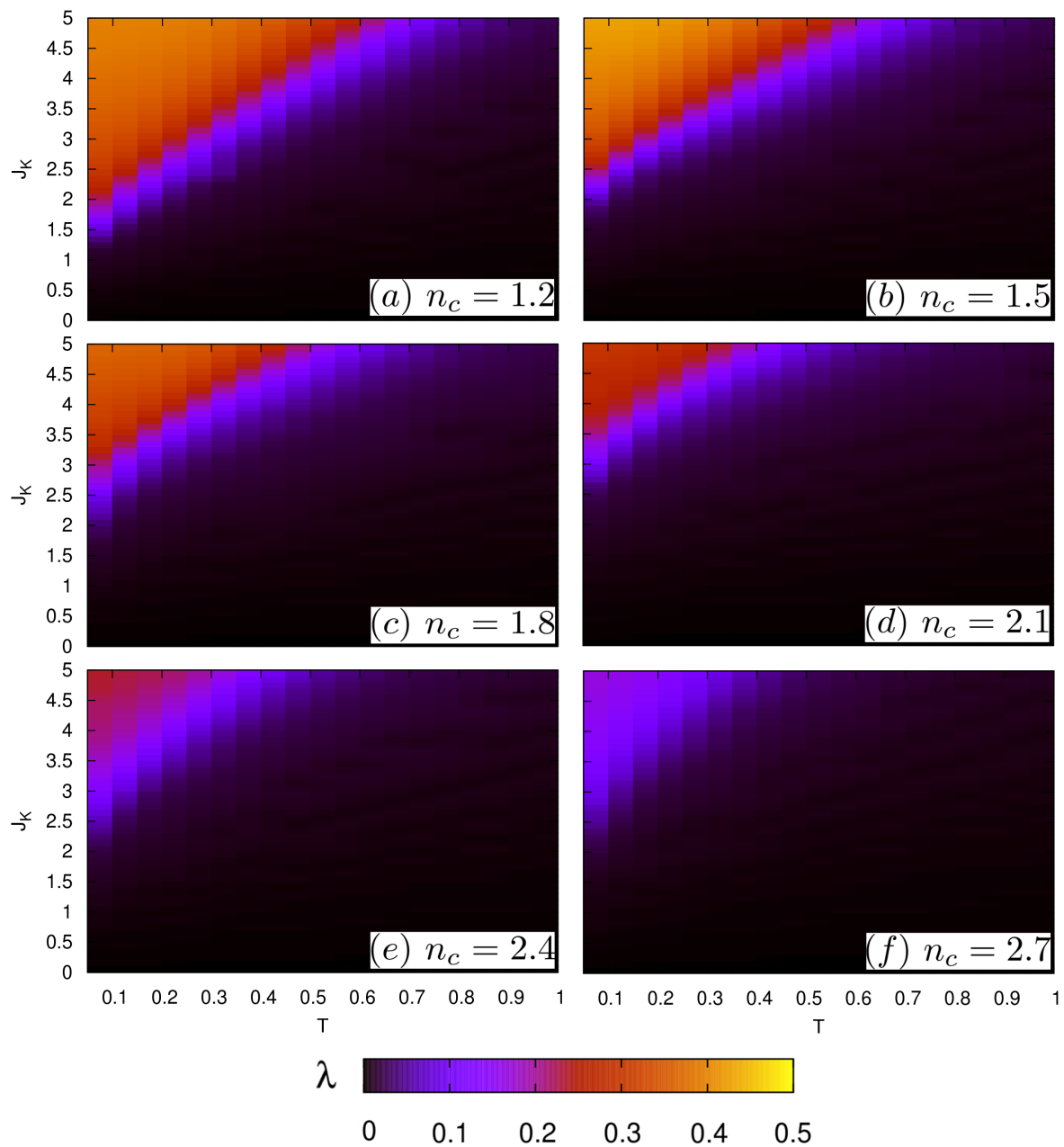


Figura 3.2: Dependência de λ com relação a J_K e T para diferentes valores de n_c . A região referente ao efeito Kondo (em tons de amarelo) é maior para valores próximos ao semipreenchimento.

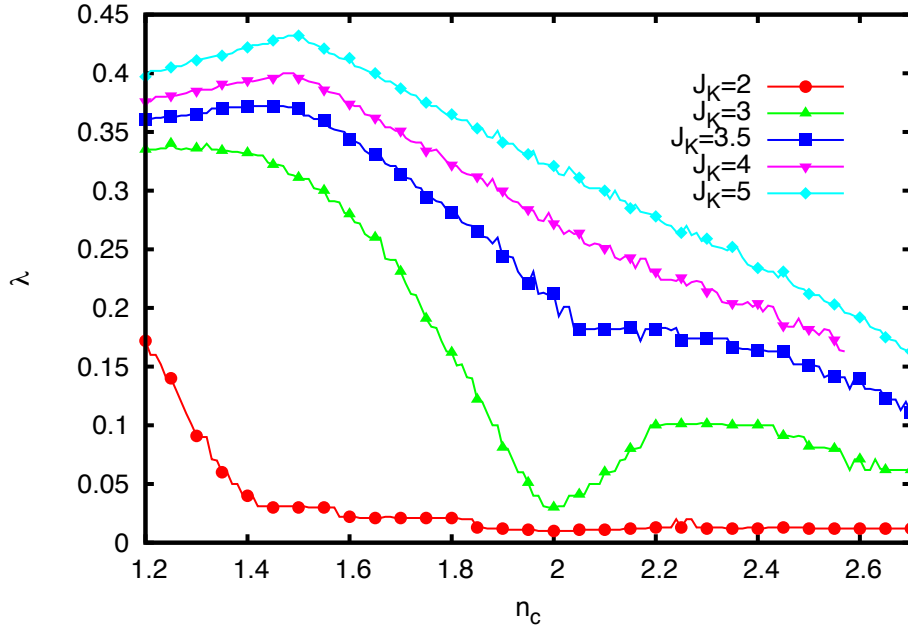


Figura 3.3: Variação do parâmetro de campo médio λ em função da ocupação n_c . O mínimo da curva $J_K = 3$ (verde), localizado em $n_c = 2$, indica que o sistema está em uma fase isolante de Kondo.

é a energia em que ocorre o toque das bandas dispersivas da rede *kagome* quando não há hibridização e há a simetria elétron-buraco.

Para $n_c = 2$ e $\lambda \neq 0$, espera-se que o sistema seja um isolante de Kondo naquela faixa de temperaturas, o que explica a queda abrupta de λ para esse preenchimento. Nesse caso o potencial químico está no gap e a densidade de estados é zero, logo $|J_K\rho| \rightarrow 0$ e T_K aproxima-se de zero. Com esse argumento apenas qualitativo, pois tal análise é feita sobre a expressão de T_K para o modelo de uma impureza, é possível entender porque essa ocupação difere-se das demais.

Capítulo 4

Caso Magnético

No capítulo anterior analisamos uma aproximação não-magnética para o problema da rede de Kondo na estrutura frustrada do tipo *kagome*. Tal aproximação, através de suas fortes imposições sobre o problema, eliminou completamente o magnetismo do sistema e proporcionou, por meio de cálculos analíticos, uma clareza dos efeitos da hibridização entre elétrons c e f .

Neste capítulo iremos incorporar, a partir de uma aproximação bem simples, os efeitos de magnetismo nesse sistema. Nesse contexto é importante recordarmos que os efeitos de frustração geométrica na rede *kagome* trazem enormes complicações para a descrição do problema. Sabemos, por exemplo, que em uma rede *kagome* de momentos magnéticos puramente localizados e com interações entre primeiros vizinhos, o comportamento do sistema é de líquido de spin e não existe uma ordem magnética de longo alcance. Sendo assim, qualquer descrição teórica do problema que considere invariâncias de translação ao longo da rede falharia.

Além das dificuldades inerentes à falta de simetria translacional em sistemas frustrados, um segundo ponto importante e igualmente problemático é a aproximação de campo médio feita sobre o hamiltoniano da rede de Kondo. Aqui destacamos não só as ausências de flutuações de spin, que são significativamente importantes para sistemas frustrados, como também a escolha dos parâmetros de campo médio utilizados no desacoplamento. Em especial, observamos que as magnetizações se dão apenas em uma direção, o que ocorre natural-

mente em sistemas magnéticos de redes bipartites, em que há ordem do tipo Néel. Por outro lado, para sistemas com frustração geométrica, os estados de menor energia costumam ser não colineares, como $q = 0$ e $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ da rede *kagome* ou estados de *spin-ice* em pirocloros.

Nesse contexto, devemos propor uma aproximação para o caso em que $J_H \neq 0$ tal que esteja de acordo com todos os aspectos acima mencionados. Além disso, apesar de não serem possíveis os cálculos analíticos, nem mesmo o das energias eletrônicas, uma redução no número de parâmetros calculados de forma autoconsistente seria bem-vinda, pois traria simplificações importantes do ponto de vista do cálculo numérico.

A aproximação que propomos para tratar do problema com interação Heisenberg é a aproximação de Estado de Kondo Parcial (do inglês *Partially Kondo State*) [22]. A idéia central dessa aproximação reside no fato de que a presença de um sítio não magnético remove a frustração geométrica local, estabilizando uma ordem magnética na região em torno dela. Tal fase foi inicialmente utilizada para sistemas de spins localizados apenas, em que os sítios desordenados eram paramagnéticos [23], porém em sistemas com elétrons itinerantes o efeito de blindagem Kondo pode ser responsável por produzir tal desordem [24].

Se por um lado a blindagem de um dos sítios elimina localmente a frustração, por outro a frustração é fundamental para a existência desse tipo de fases mistas. Para justificarmos tal afirmação, vamos considerar um sistema em que cada sítio possa assumir três configurações distintas: ser não magnético (por efeito de blindagem), ser magnético com spin up ou down. Assume-se que há duas energias distintas no sistema, sendo uma a interação antiferromagnética entre dois sítios magnéticos vizinhos ($-J$ para spins antiparalelos) e a outra uma energia local V associada ao fato de existir um momento magnético em um dado sítio. Esta última energia pode ser relacionada, por exemplo, a uma anisotropia magnética no sistema¹.

Considerando a situação proposta acima em um problema de três sítios em um triângulo, observamos na figura 4.1 que existem duas configurações apenas que podem ser de energia mínima, dependendo da relação entre as duas energias do problema. Para $2V > J$, observamos que o estado de menor energia é aquele que possui todos os três sítios blindados,

¹De fato o importante é considerar que a energia de um sítio magnético é maior que a de um blindado

enquanto que para $2V < J$ a menor energia é a de um estado com coexistência de sítios magnéticos e não-magnéticos, em um típico estado PKS.

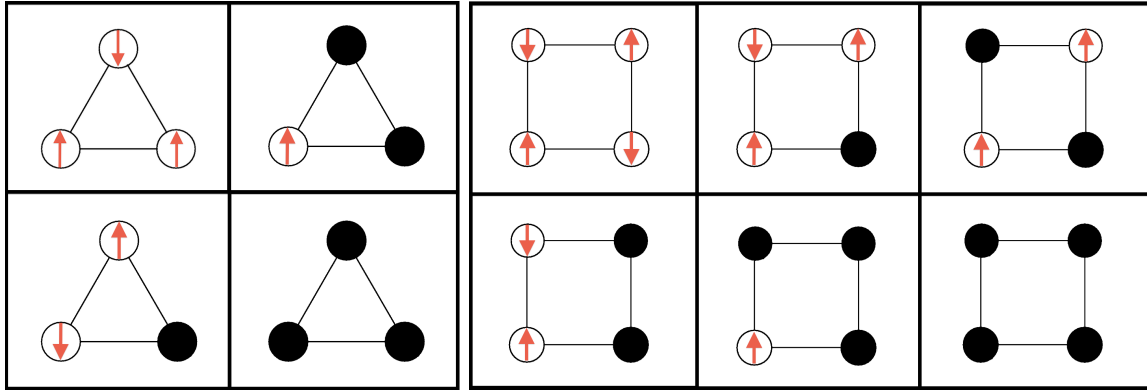


Figura 4.1: Representação gráfica de possíveis configurações para o triângulo e o quadrado. Apenas o triângulo pode ter um estado fundamental “misto”, que é a configuração inferior à esquerda (estado PKS).

Se analisarmos agora um problema de quatro sítios dispostos em um quadrado, voltamos a ter apenas duas configurações que minimizam energia, porém agora nenhuma delas é um estado com coexistência. Se $V > J$, temos novamente uma configuração com todos sítios não-magnéticos, mas para $V < J$ o sistema assume uma ordem do tipo Néel com quatro spins anti-paralelos em relação a seus vizinhos.

Com tal construção altamente simplificada, podemos constatar que apenas em uma geometria frustrada poderíamos obter uma configuração mista com mais baixa energia.

4.1 Aproximação PKS no hamiltoniano de campo médio

Apresentada a aproximação e argumentada sua existência em sistemas frustrados, resta-nos agora aplicá-la a nosso problema. Para tanto, devemos voltar ao hamiltoniano efetivo do Capítulo 2 e verificarmos o que acontece com as energias apresentadas em (2.17). Assumiremos que o sítio C da base esteja completamente blindado, portanto seu momento magnético é nulo e a energia de hibridização nesse sítio será considerada como aproximadamente a máxima do caso não-magnético (considerando $J_K \sim 5$ e $\lambda \sim 0.5$), a saber,

$\tilde{V}_{MAX} = 2$. Com isso garantimos que a hibridização seja sempre maior que a dos demais sítios e mantemos a abordagem consistente. Tais imposições são escritas matematicamente como:

$$\tilde{V}_{C\sigma} = \tilde{V}_{MAX} \quad \text{e} \quad \langle S_C^z \rangle = 0 \quad (4.1)$$

Os outros dois sítios podem ou não estarem blindados, dependendo da temperatura, J_K e da ocupação n_c . Por simetria, as hibridizações nos dois sítios devem ser as mesmas e independentes de spin, sendo as magnetizações iguais em módulo, porém com sinais trocados. Iremos desconsiderar a magnetização dos elétrons de condução, pois imagina-se que estas não sejam determinantes no comportamento do sistema ². Por fim, as correlações magnéticas de curto alcance serão desprezadas pois não são importantes em uma fase ordenada AF [25].

Com as considerações acima feitas, temos:

$$\begin{aligned} \tilde{V} &\equiv \tilde{V}_{A\sigma} = \tilde{V}_{B\sigma}, \\ \langle S_A^z \rangle &\equiv M \Rightarrow \langle S_B^z \rangle = -M, \\ \langle s_\alpha^z \rangle &= 0, \forall \alpha \quad \text{e} \\ \Gamma_{\alpha\beta}^\sigma &= 0, \forall \alpha, \beta. \end{aligned} \quad (4.2)$$

Sendo assim:

$$\begin{aligned} \frac{J_K}{2} \langle S_A^z \rangle &\equiv E_c \Rightarrow \epsilon_{A\sigma}^c = \sigma E_c, \quad \epsilon_{B\sigma}^c = -\sigma E_c, \quad \epsilon_{C\sigma}^c = 0; \\ \frac{J_H}{2} \langle S_A^z \rangle &\equiv M \Rightarrow \epsilon_{A\sigma}^f = E_f - \sigma M, \quad \epsilon_{B\sigma}^f = E_f + \sigma M, \quad \epsilon_{C\sigma}^f = E_f; \\ \tilde{t}_{AB}^\sigma &\equiv t. \end{aligned} \quad (4.3)$$

²Para $J_H > J_K$, que é a região em que espera-se magnetismo, o termo proporcional a $\langle s^z \rangle$ em ϵ_σ^f pode ser visto como uma pequena contribuição à magnetização f , portanto não há a necessidade de a considerarmos como um parâmetro autoconsistente.

Nessas condições as matrizes referentes às equações (2.22) se tornam:

$$\begin{aligned} \mathbb{C}_\sigma &= \begin{pmatrix} \sigma E_c - \omega & -2t \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_{AB}) & -2t \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_{AC}) \\ -2t \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_{AB}) & -\sigma E_c - \omega & -2t \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_{BC}) \\ -2t \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_{AC}) & -2t \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_{BC}) & -\omega \end{pmatrix}, \\ \mathbb{F}_\sigma &= \begin{pmatrix} E_f - \sigma M - \omega & 0 & 0 \\ 0 & E_f + \sigma M - \omega & 0 \\ 0 & 0 & E_f - \omega \end{pmatrix} \quad \text{e} \quad \mathbb{V}_\sigma = \begin{pmatrix} \tilde{V} & 0 & 0 \\ 0 & \tilde{V} & 0 \\ 0 & 0 & \tilde{V}_{MAX} \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (4.4)$$

4.2 Resultados Numéricos

Conforme discutido ao fim do terceiro capítulo, a solução das equações matriciais contidas em (2.26) envolve operações de inversão de matrizes complicadas, o que impossibilita o cálculo analítico das energias eletrônicas e funções espectrais. Ainda que resultados analíticos não sejam possíveis dentro dessa aproximação, sabemos que a função de Green permanece sendo de quasipartículas³, portanto as somas sobre frequências de Matsubara podem ser utilizada para os cálculos de ocupação.

Obtivemos a solução algébrica de (2.26) para as matrizes definidas em (4.4) através do programa *Mathematica*. A partir dessas Funções de Green, realizamos numericamente somas sobre 1000 frequências de Matsubara, considerando o conjunto de 18 pontos de simetria da rede recíproca obtidos pelo método de Chadi-Cohen, apresentado no Apêndice A.

Os cálculos autoconsistentes envolvem agora dois parâmetros, que são a magnetização dos elétrons f (M) e a hibridização (λ) nos sítios A e B. Como há uma simetria entre o sítio A e o sítio B, considerando uma inversão de spin, podemos calcular estes dois parâmetros a partir de Funções de Green de apenas um dos sítios. No entanto, quando é feito o cálculo do potencial químico e da posição do nível f , é necessário levar em conta as funções *totais*, relativas aos três sítios.

A figura 4.2 apresenta a variação de λ e M em função de J_K para diferentes tempe-

³As funções de Green possuem seis pólos não degenerados exceto em pontos de simetria, em que há degenerescências acidentais.

raturas, considerando fixos $J_H = 4$ e $n_c = 1, 5$ por direção de spin ⁴. Os resultados mostram que o aparecimento do efeito Kondo com o aumento de J_K extingue a fase magnética, que é consequência da blindagem dos elétrons localizados pela banda de condução.

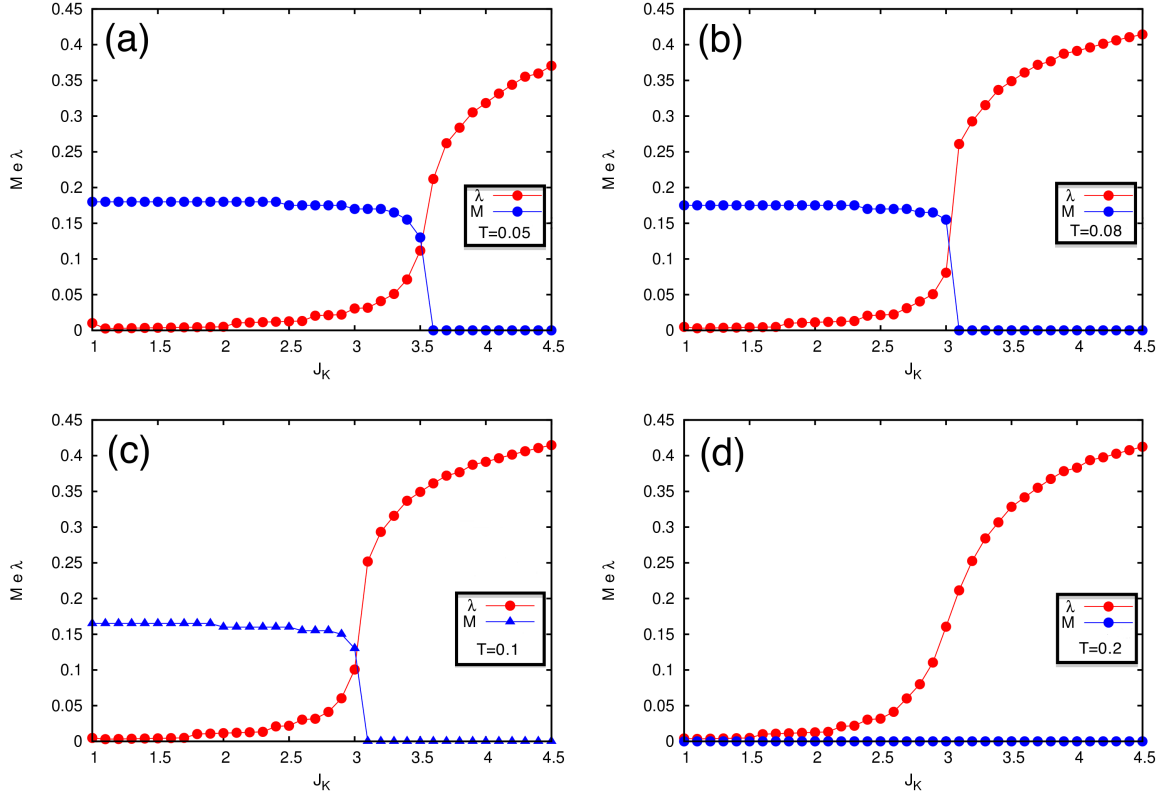


Figura 4.2: Variação de M e λ em função de J_K para temperaturas (a) $T = 0.05$, (b) $T = 0.08$, (c) $T = 0.1$ e (d) $T = 0.2$, considerando $J_H = 4$ e $n_c = 1, 5$.

A magnetização para $J_K = 0$ é inversamente proporcional à temperatura, mas não chega a atingir a saturação nas temperaturas consideradas. Esta deve ser observada para temperaturas menores, porém o método de soma sobre frequências não nos permite encontrar resultados convergentes para tais temperaturas. Para $T = 0.2$, $M = 0$ para qualquer J_K , entretanto ainda há o aparecimento de uma fase Kondo para $J_K > 3$, o que sugere que a escala de energia do efeito Kondo seja maior que a de ordem magnética nessa aproximação.

Em princípio nesse tipo de sistema não é esperada a coexistência de efeito Kondo e

⁴Embora o problema não seja mais independente de spin, as ocupações totais de spin up e down são idênticas, dada a simetria do problema.

magnetismo nos sítios A e B [25], embora haja coexistência em sítios diferentes por causa das imposições sobre o sítio C. Nossos resultados indicam que para temperaturas mais baixas a coexistência pode existir em um certo intervalo de J_K , porém existe também a possibilidade que esta seja uma região de metaestabilidade. Novos cálculos numéricos, especialmente para temperaturas mais baixas, poderão responder estas questões.

Capítulo 5

Conclusões e Perspectivas

Nessa dissertação estudamos o modelo da rede de Kondo em um sistema com frustração geométrica. A importância desses estudos justifica-se pela existência de compostos de férmions pesados em que os íons terras-raras estão dispostos em geometrias frustradas, como o caso do YbAgGe. Como consequência da frustração há o aparecimento de uma série de comportamentos anômalos que deixam ainda mais complexo o diagrama de fases desses sistemas, dada a proximidade de pontos críticos quânticos e múltiplas interações de energias similares.

Utilizamos a aproximação de campo médio como método para calcular médias que definem diferentes fases do sistema. Essa abordagem é a usual para modelos como o da rede de Kondo e permite a obtenção de resultados similares ao esquematicamente proposto por Doniach. Embora a aproximação de campo médio seja altamente restritiva, tendo em vista que todas as flutuações são deixadas de lado, ela é suficiente para justificar qualitativamente resultados experimentais, especialmente a transição entre fases com ordem magnética e com momentos blindados. Tais resultados são bons para redes bipartites em que a interação RKKY não produza frustração, especialmente porque as correlações desprezadas na aproximação não contribuiriam para modificar o comportamento das fases.

Em sistemas em que há frustração geométrica, as flutuações de spin são fundamentais para a correta descrição do sistema e a utilização de aproximações de campo médio, pelo menos do ponto de vista de modelos com momentos apenas localizados, não se justifica e não

é usual. Nesse contexto, a utilização desse tipo de aproximação sobre todo o hamiltoniano (2.1) não deve ser a mais adequada.

Uma segunda consideração importante diz respeito às simetrias do sistema. Para que o sistema possa ter invariância translacional, é necessário que haja ordem magnética, ainda que esta seja complicada e envolva uma base magnética muito grande. Vimos que a rede *kagome* é uma forte candidata a ser um líquido de spin, em que a inexistência de correlações magnéticas de qualquer ordem previne o ordenamento, mesmo à temperatura zero.

No Capítulo 3 efetuamos uma aproximação que desprezava o termo de troca entre momentos localizados. Com isso conseguimos obter as energias dos elétrons do sistema (eq. (3.4)), que são similares às encontradas na literatura [5,6], como também as funções espectrais das Funções de Green, permitindo cálculos autoconsistentes via integral da densidade de estados. Vimos que o efeito Kondo dá aos elétrons f uma pequena itinerância e produz a abertura de um gap próximo à energia desses níveis.

Nos cálculos autoconsistentes para o caso não magnético foi observada a existência de duas fases distintas, com $\lambda = 0$ e $\lambda \neq 0$. A extensão da região Kondo e o valor máximo de λ dependem da ocupação dos elétrons c , sendo menores quanto mais n_c se afasta do semipreenchimento. Tal resultado está relacionado com a exaustão de Nozières [26], pois a “intensidade” do efeito Kondo depende do número de elétrons de condução disponíveis para a blindagem.

No Capítulo 4 sugerimos uma aproximação conveniente para o problema magnético $J_H \neq 0$, levando em consideração as restrições feitas pela aproximação de campo médio e pela invariância translacional imposta no sistema. Tal aproximação, denominada PKS, é baseada em trabalhos que utilizam métodos variacionais com o intuito de encontrar funções de onda de menor energia para modelos similares ao da rede de Kondo [22]. Estes métodos, diferentemente do nosso caso, permitem a distinção entre uma fase ordenada de longo alcance e fases em que há a blindagem parcial dos elétrons f , embora apresentem os problemas típicos de *Monte Carlo Quântico* e de sistemas finitos.

Nossos resultados para o caso magnético PKS indicam, conforme esperado, que a fase magnética desaparece com o aumento de T ou J_K e com a diminuição de J_H . A fase

magnética é mais “sensível” ao aumento de temperatura, tendo em vista que para $T = 0.2$ já não há magnetização em $J_K = 0$ mesmo para $J_H = 4$, enquanto que no caso não magnético a fase Kondo está presente para $T \sim 0.5$ e $J_K = 4$.

A ausência de resultados mais conclusivos para a parte magnética deve-se a dois fatores. O primeiro deles é relativo à razão entre a complexidade do problema e o tempo disponível para sua resolução, que nos restringiu a buscarmos as soluções mais simples. O segundo fator foi a dificuldade de encontrarmos soluções autoconsistentes com a fase PKS, o que dá indícios de que esta fase talvez não seja a mais instável possível.

O grande revés de considerar o estado PKS em sistemas no limite termodinâmico é que não é possível desassociá-lo de um estado de ordem magnética de longo alcance e com quebra de simetria. Em princípio não há nenhuma evidência experimental que sustente estas propriedades, portanto os resultados aqui obtidos devem ser vistos como uma primeira aproximação ao problema e fases magnéticas mais complexas deverão ser estudadas no futuro.

No que diz respeito às perspectivas do trabalho, está em nossos planos, além da extensão de fases magnéticas estudadas, a obtenção de diagramas de energia livre para os casos aqui considerados. A análise da energia livre supre uma carência importante desse trabalho, que é o desconhecimento da estabilidade das fases apresentadas, e deve ser útil nas regiões dos parâmetros em que a convergência não foi obtida.

Em uma segunda linha de trabalho serão estudados métodos para sofisticarmos a influência da frustração geométrica em nosso modelo, uma vez que a aproximação de campo médio para a parte “frustrada” do hamiltoniano certamente não é a melhor abordagem para este problema. Naturalmente a complexidade deste estudo é ainda maior do que a do contido nesta dissertação e possivelmente será tema de um trabalho futuro de doutorado.

Apêndice A

Método de Chadi-Cohen

Neste trabalho tivemos que calcular uma série de somas sobre vetores no espaço recíproco, onde utilizamos a técnica dos pontos especiais desenvolvida por D. J. Chadi e M. L. Cohen há aproximadamente 40 anos [27, 28]. Naturalmente existem outros métodos que efetuam tais somas, sendo alguns deles baseados em escolhas de pontos de simetria (similares aos aqui apresentados) e outros empregando interpolações e discretizações no espaço recíproco. Em ambos os casos, o erro diminui à medida que aumentamos o conjunto de pontos utilizados, no entanto, na primeira classe de métodos esses conjuntos são significativamente menores.

O método de Chadi-Cohen é um procedimento sistemático que permite gerar conjuntos de pontos dentro de uma região da zona de Brillouin (ZB) a partir de operações de simetria da mesma. A média de qualquer função periódica na ZB pode ser aproximada pela média desta calculada em tais conjuntos de pontos.

Consideremos a soma S sobre um conjunto de vetores discretos,

$$S = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k} \in BZ} g(\mathbf{k}) = \frac{V}{(2\pi)^3} \int_{BZ} g(\mathbf{k}) d^3k, \quad (\text{A.1})$$

em que $g(\mathbf{k})$ é uma função periódica em relação à vetores da rede recíproca e bem comportada, podendo então ser expandida em uma série de Fourier. A partir dessa função podemos construir uma função $f(\mathbf{k})$ que possua toda a simetria da rede, nesse caso podemos

escrever

$$f(\mathbf{k}) = f_0 + \sum_{m=1}^{\infty} f_m A_m(\mathbf{k}), \quad (\text{A.2})$$

em que

$$A_m(\mathbf{k}) = \sum_{|\mathbf{R}|=C_m} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} \quad (\text{A.3})$$

são funções que estão relacionadas com conjunto de N_m vetores \mathbf{R} de mesma norma C_m que são equivalentes por operações de simetria. Por construção, estas funções são reais, possuem as mesmas simetrias da rede e que obedecem a propriedades de média zero sobre o volume V da ZB e ortonormalidade, escritas como:

$$\frac{V}{(2\pi)^3} \int_{BZ} A_m(\mathbf{k}) d^3k = 0, \quad \forall m \quad \text{e} \quad (\text{A.4})$$

$$\frac{V}{(2\pi)^3} \int_{BZ} A_m(\mathbf{k}) A_n(\mathbf{k}) d^3k = N_n \delta_{mn} \quad (\text{A.5})$$

Pela propriedade contida em (A.4) e por (A.2), vemos que:

$$S = \frac{V}{(2\pi)^3} \int_{BZ} f(\mathbf{k}) = f_0. \quad (\text{A.6})$$

Portanto a soma pode ser substituída pelo conhecimento de f_0 . Levando em conta (A.2), vemos que se existisse um vetor \mathbf{k}_0 tal que

$$A_m(\mathbf{k}_0) = 0, \quad \forall m, \quad (\text{A.7})$$

então $f_0 = f(\mathbf{k}_0)$, ou seja, a média sobre $f(\mathbf{k})$ seria simplesmente tal função aplicada nesse ponto \mathbf{k}_0 . Na prática esse ponto não existe, mas podem ser gerados conjuntos de pontos que obedecem A.7 até um dado valor ($m = M$). Impondo que esses vetores \mathbf{k}_i , pertencentes a tais conjuntos, sigam as seguintes restrições:

$$\sum_{i=1}^n \alpha_i A_m(\mathbf{k}_i) = 0, \quad \text{para } m = 1, 2, \dots, M \quad \text{e} \quad (\text{A.8})$$

$$\sum_{i=1}^n \alpha_i = 1 \quad (\text{A.9})$$

Com as equações acima escrevemos (A.2) como

$$f_0 = \sum_{i=1}^n \alpha_i f(\mathbf{k}_i) - \sum_{m>M} \sum_{i=1}^n \alpha_i f_m A_m(\mathbf{k}_i), \quad (\text{A.10})$$

em que o segundo termo pode ser desprezado pois f_{M+1} é pequeno para $M \rightarrow \infty$. Finalmente:

$$f_0 \approx \sum_{i=1}^n \alpha_i f(\mathbf{k}_i). \quad (\text{A.11})$$

O mecanismo de geração de conjunto de vetores é simples. Sejam dois vetores \mathbf{k}_1 e \mathbf{k}_2 tais que $A_{m_1}(\mathbf{k}_1) = 0$ e $A_{m_2}(\mathbf{k}_2) = 0$, então $A_m(\mathbf{k}_1)A_m(\mathbf{k}_2) = 0$ para $m = m_1, m_2$. Usando a definição de $A_m(\mathbf{k})$ contida em (A.3), temos:

$$\left(\sum_{|\mathbf{R}|=C_m} e^{i\mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{R}} \right) \left(\sum_{|\mathbf{R}|=C_m} e^{i\mathbf{k}_2 \cdot \mathbf{R}} \right) = \left(\sum_{|\mathbf{R}|=C_m} e^{i\mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{R}} \right) \left(\sum_j^{n_T} e^{i\mathbf{k}_2 \cdot T_j \mathbf{R}} \right) = 0. \quad (\text{A.12})$$

Como $\mathbf{k}_2 \cdot T_j \mathbf{R} = (T_j)^{-1} \mathbf{k}_2 \cdot \mathbf{R} = T_j' \mathbf{k}_2 \cdot \mathbf{R}$ pelas propriedades das operações de simetria.

Então:

$$\sum_{|\mathbf{R}|=C_m} \sum_j^{n_T} e^{i(\mathbf{k}_1 + T_j \mathbf{k}_2) \cdot \mathbf{R}} = \sum_j^{n_T} A_m(\mathbf{k}_1 + T_j \mathbf{k}_2) = 0, \text{ para } m = m_1, m_2. \quad (\text{A.13})$$

De tal demonstração conclui-se que, conhecendo dois vetores que zerem A_m para diferentes valores de m , então é possível construir um conjunto de vetores \mathbf{k}_j que também o faz para $m' \geq m$.

A.1 Pontos especiais para a rede *kagome*

Vamos então aplicar o método de Chadi-Cohen para gerar conjuntos de vetores de onda para a rede *kagome*. Utilizando os vetores de rede apresentados na figura 1.5, dados por

$$\begin{aligned} \mathbf{R}_1 &= a(\hat{i} + \sqrt{3}\hat{j}) \quad \text{e} \\ \mathbf{R}_2 &= 2a\hat{i}, \end{aligned} \quad (\text{A.14})$$

podemos escrever $A_m(\mathbf{k})$ para $m=1$:

$$A_1(\mathbf{k}) = 2 \cos(2k_x a) + 4 \cos(k_x a) \cos(\sqrt{3}k_y a). \quad (\text{A.15})$$

Escolhemos como ponto que zera tal função¹ ($\rho \equiv 1/\sqrt{3}$):

$$\mathbf{k}_1 = (1/3; \rho/3). \quad (\text{A.16})$$

¹Os vetores do espaço recíproco estão escritos em unidades de π/a

Para $m=2$ a relação é:

$$A_2(\mathbf{k}) = 2 \cos\left(2\sqrt{3}k_y a\right) + 4 \cos\left(3k_x a\right) \cos\left(\sqrt{3}k_y a\right). \quad (\text{A.17})$$

Como $A_2(\mathbf{k}_1) \neq 0$, devemos escolher \mathbf{k}_2 que o faça. Tal ponto é

$$\mathbf{k}' = (2/9; 0). \quad (\text{A.18})$$

A combinação dos primeiros dois vetores, considerando a redução à zona irreductível, resulta em:

$$\begin{aligned} \mathbf{k}_2^1 &= (2/9; 0) \quad \alpha = 1/3, \\ \mathbf{k}_2^2 &= (2/9; 2\rho/3) \quad \alpha = 1/3, \\ \mathbf{k}_2^3 &= (5/9; \rho/3) \quad \alpha = 1/3. \end{aligned} \quad (\text{A.19})$$

Tais pontos valem para $m \leq 4$. Para $m = 5$ o vetor que faz

$$A_5 = 2 \cos\left(3\sqrt{3}k_x a\right) + 4 \cos\left(6k_x a\right) \cos\left(3\sqrt{3}k_y a\right) \quad (\text{A.20})$$

zerar é o

$$\mathbf{k}' = (1/9; \rho/9). \quad (\text{A.21})$$

Tomando $\mathbf{k}_3^i = \mathbf{k}_2^j + T_i \mathbf{k}'$ e os restringindo à zona irreductível, obtemos:

$$\begin{aligned} \mathbf{k}_3^1 &= (1/9; \rho/9) \quad \alpha = 1/9, \\ \mathbf{k}_3^2 &= (2/9; 2\rho/9) \quad \alpha = 1/9, \\ \mathbf{k}_3^3 &= (1/3; \rho/9) \quad \alpha = 2/9, \\ \mathbf{k}_3^4 &= (4/9; 2\rho/9) \quad \alpha = 2/9, \\ \mathbf{k}_3^5 &= (4/9; 4\rho/9) \quad \alpha = 1/9, \\ \mathbf{k}_3^6 &= (5/9; \rho/9) \quad \alpha = 2/9. \end{aligned} \quad (\text{A.22})$$

Estes vetores deixam de satisfazer $A_m(\mathbf{k}) = 0$ apenas para $m = 12$. Nesse caso escolhemos:

$$\mathbf{k}' = (2/27; 0). \quad (\text{A.23})$$

Com a operação de geração de conjuntos de vetores obtemos os dezoito pontos abaixo:

$$\begin{aligned}
 (2/27; 0) \quad \alpha = 2/36, & \quad (4/27; 0) \quad \alpha = 2/36, \\
 (5/27; \rho/9) \quad \alpha = 4/36, & \quad (7/27; \rho/9) \quad \alpha = 3/36, \\
 (8/27; 0) \quad \alpha = 1/36, & \quad (8/27; 2\rho/27) \quad \alpha = 3/36, \\
 (10/27; 0) \quad \alpha = 1/36, & \quad (10/27; 2\rho/9) \quad \alpha = 2/36, \\
 (11/27; \rho/9) \quad \alpha = 2/36, & \quad (11/27; 3\rho/9) \quad \alpha = 3/36, \\
 (13/27; \rho/9) \quad \alpha = 2/36, & \quad (13/27; 3\rho/9) \quad \alpha = 3/36, \\
 (14/27; 0) \quad \alpha = 1/36, & \quad (14/27; 2\rho/9) \quad \alpha = 2/36, \\
 (14/27; 4\rho/9) \quad \alpha = 1/36, & \quad (16/27; 0) \quad \alpha = 1/36, \\
 (16/27; 2\rho/9) \quad \alpha = 2/36, & \quad (17/27; \rho/9) \quad \alpha = 1/36.
 \end{aligned} \tag{A.24}$$

A figura A.1 apresenta os dezoito pontos inseridos na região irredutível da ZB. Suas cores representam os pesos de cada um desses pontos.

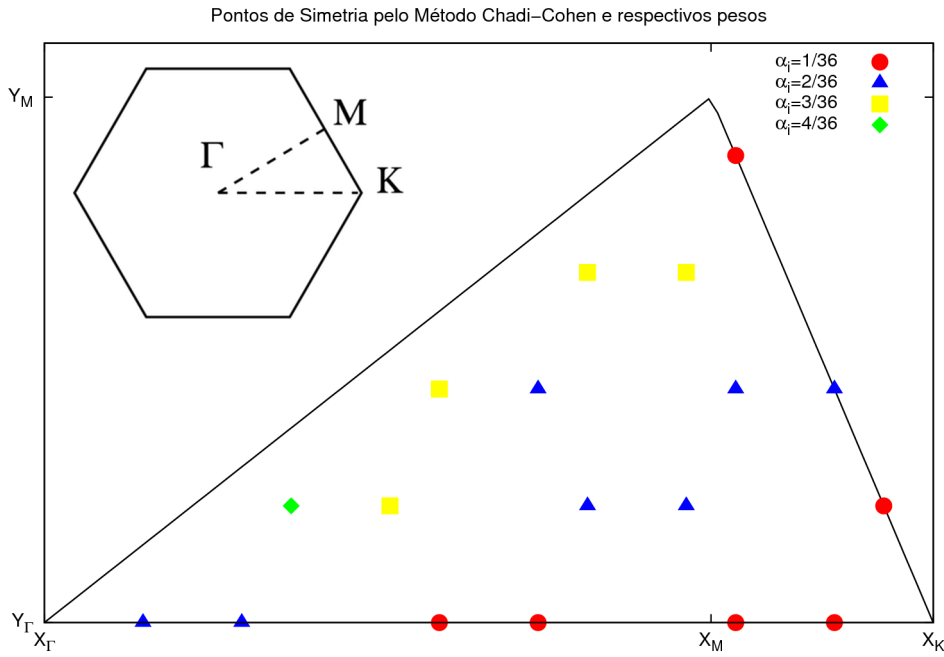


Figura A.1: Pontos de simetria para a rede hexagonal.

Apêndice B

Cálculos de números de ocupação

Apresentamos nesse trabalho resultados de cálculos autoconsistentes para o modelo da Rede de Kondo em uma geometria *kagome*. Para tanto, tivemos que calcular números de ocupação a partir das Funções de Green [29, 30] provenientes da aproximação de campo médio de nosso modelo. Na primeira parte do trabalho, em que desconsideramos o termo de Heisenberg do hamiltoniano, utilizamos integrais sobre as densidades de estados. Na segunda parte, devido às complicações em encontrar analiticamente as estruturas de bandas dos elétrons, utilizamos o método da soma sobre as frequências de Matsubara. Em ambos os casos tais procedimentos foram feitos numericamente, dada a complexidade do problema.

B.1 Método da Densidade de Estados

Densidade de Estados (DOS, da sigla em inglês de *density of states*) é simplesmente o número de estados por intervalo de energia que estão disponíveis para os elétrons ocuparem. O cálculo da densidade de estados é possível de ser feito analiticamente em casos muito particulares, como por exemplo para um sistema de elétrons livres, em que a dispersão eletrônica é parabólica.

No que diz respeito às Funções de Green, o cálculo da DOS é facilmente compreendido através da representação espectral destas. Podemos escrever qualquer Função de Green

(retardada) como:

$$G_R(\mathbf{k}, \omega) = \sum_j \frac{F_j(\mathbf{k}, \omega)}{\omega - \varepsilon_j(\mathbf{k}) + i\delta}. \quad (\text{B.1})$$

Aqui o índice j varre todas as energias (pólos) contidas na FG, sendo $\varepsilon_j(\mathbf{k})$ seus respectivos valores para um dado vetor de onda. $F_j(\mathbf{k}, \omega)$ é definida como função espectral associada a $\varepsilon_j(\mathbf{k})$ e ela representa, *grosso modo*, a probabilidade de que uma partícula tenha uma energia ω e esteja em um estado caracterizado por \mathbf{k} . Utilizando a relação

$$\frac{1}{\omega - E + i\delta} = \mathcal{P} \frac{1}{\omega - E} - i\pi\delta(\omega - E) \quad (\text{B.2})$$

e considerando que $F_j(\mathbf{k}, \omega)$ é real, assim como o primeiro termo ao lado esquerdo da igualdade acima, podemos escrever:

$$\sum_j F_j(\mathbf{k}, \omega)\delta(\omega - \varepsilon_j(\mathbf{k})) = -\frac{1}{\pi} \text{Im}G(\mathbf{k}, \omega). \quad (\text{B.3})$$

A densidade de estados do sistema é dada pela soma de (B.3) sobre todos os vetores do espaço recíproco, que chamaremos de $\mathcal{D}(\omega)$:

$$\mathcal{D}(\omega) \equiv -\frac{1}{\pi} \sum_{\mathbf{k}} \text{Im}(G(\mathbf{k}, \omega)). \quad (\text{B.4})$$

Para calcularmos as ocupações, devemos calcular a integral da DOS sobre os estados ocupados do sistema. Se o sistema está à temperatura zero, os estados ocupados são aqueles de energia menor ou igual à energia de Fermi (E_F), portanto:

$$n(T=0) = \int_{-\infty}^{E_F} d\omega \mathcal{D}(\omega). \quad (\text{B.5})$$

Se o sistema está à temperatura finita, a probabilidade de ocupar um estado acima do potencial químico é dependente da temperatura e é dada pela distribuição de Fermi-Dirac ($\beta \equiv T^{-1}$):

$$n_F(\omega) = \frac{1}{1 + e^{\beta(\omega - \mu)}}. \quad (\text{B.6})$$

Como consequência, devemos multiplicar a DOS por essa distribuição e integrar sobre todas as energias:

$$n = \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega n_F(\omega) \mathcal{D}(\omega). \quad (\text{B.7})$$

Naturalmente o cálculo de ocupações pelo método aqui apresentado depende do conhecimento de $\varepsilon_j(\mathbf{k})$ e $F_j(\mathbf{k}, \omega)$, que nem sempre podem ser obtidos, como pode ser visto ao longo deste trabalho.

B.2 Método da soma sobre as frequências de Matsubara

Vimos na seção anterior que o número de ocupação referente a uma dada Função de Green à temperatura finita pode ser calculado a partir da forma genérica (assumindo que em G está contida a soma sobre o espaço recíproco):

$$n = \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega n_F(\omega) \left(-\frac{1}{\pi} \text{Im} G_R(\omega) \right). \quad (\text{B.8})$$

Ainda que não seja possível escrever a Função de Green em termos de frações parciais, podemos resolver essa integral graças a um truque envolvendo a análise de variáveis complexas. Reescrevemos (B.8) como:

$$n = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \left[\int_{-\infty}^{+\infty} d\omega n_F(\omega) G(\omega) \right]. \quad (\text{B.9})$$

A integral dentro dos colchetes pode ser levada ao plano complexo, sendo substituída por uma integral em torno de um caminho circular com $R \rightarrow \infty$ menos a contribuição sobre o círculo (que, utilizando um fator de regularização, é nula nesse limite). Essa integral de caminho pode ser calculada através do Teorema dos Resíduos, uma vez que os pólos do integrando são conhecidos: no eixo real encontram-se os pólos da FG de Matsubara, que são as energias eletrônicas conforme discutido anteriormente, enquanto que em uma reta paralela ao eixo complexo se situam os pólos da distribuição de Fermi, que ocorrem nas frequências fermiônicas ω_n :

$$\omega_n = \frac{(2n+1)i\pi}{\beta} + \mu. \quad (\text{B.10})$$

Conhecendo os resíduos nesses pólos ($-1/\beta$), conseguimos transformar essa integral

em uma soma sobre as frequências fermiônicas:

$$n = \frac{1}{\beta} \lim_{\tau \rightarrow 0} \sum_{\omega_n} G(\omega_n) e^{-i\omega_n \tau}. \quad (\text{B.11})$$

Da propriedade das FG de Matsubara, temos que $G(\omega_n) = (G(\omega_n^*))^*$ e podemos restringir a soma sobre as frequências positivas apenas:

$$n = \frac{2}{\beta} \lim_{\tau \rightarrow 0} \sum_{\omega_n > 0} (\text{Re}G(\omega_n) \cos(\omega_n \tau) + \text{Im}G(\omega_n) \text{sen}(\omega_n \tau)). \quad (\text{B.12})$$

O argumentos das exponenciais vão a zero ainda que $n \rightarrow \infty$, pois a função de τ é garantir que $\omega_n \tau \rightarrow 0$. Nesse limite ($n \rightarrow \infty$), temos que $G(\omega_n) \rightarrow C/\omega_n$ ($C=3$ para nossas FGs) e

$$\frac{1}{\omega_n} \sim -i \frac{1}{\Omega_n} + \frac{1}{\Omega_n^2}, \quad (\text{B.13})$$

em que $\Omega_n = \text{Im}\omega_n$. $\text{Re}G$ vai mais rápido que $1/\Omega_n$, portanto podemos tomar $\tau = 0$ no primeiro termo da soma. Para o segundo termo utilizamos $\text{Im}G 1/\Omega_n$ e o transformamos em uma integral:

$$n = \frac{2}{\beta} \lim_{\tau \rightarrow 0} \sum_{\omega_n > 0} \text{Im}G(\omega_n) \text{sen}(\omega_n \tau) = \frac{2}{\beta} \lim_{\tau \rightarrow 0} \left(\frac{1}{2\pi} \int_0^{+\infty} C \frac{\text{sen}(\Omega_n \tau)}{\Omega_n \tau} d(\Omega_n \tau) \right) = \frac{C}{2}. \quad (\text{B.14})$$

Para a última igualdade consideramos a integral imprópria

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx \frac{\text{sen} \pi x}{\pi x} = 1 \quad (\text{B.15})$$

e o fato de $0 < \tau < \beta$.

Podemos escrever então:

$$n = \frac{2}{\beta} \sum_{\omega_n > 0} \text{Re}G(\omega_n) + \frac{C}{2}. \quad (\text{B.16})$$

Como há a necessidade de fazermos cálculos numéricos para contabilizarmos tais somas sobre frequências e este não pode ser conduzido *ad infinitum*, devemos ter um método sistemático para truncá-la. Podemos escolher uma frequência de corte, suficientemente grande,

em que possa ser tomado o limite assintótico da FG e transformada a soma em uma integral. Dessa forma:

$$\frac{2}{\beta} \sum_{\omega_n > 0} \text{Re}G(\omega_n) = \frac{2}{\beta} \sum_{\omega_n > 0}^{\omega_c} \text{Re}G(\omega_n) + \frac{2}{\beta} \frac{\beta}{2\pi i} \int_{\omega_c}^{+\infty} d\omega_n \text{Re} \frac{C}{\omega_n}. \quad (\text{B.17})$$

Definindo $\omega_n \equiv E_F + iy$ e usando $\text{Re}G = \frac{CE_F}{E_F^2 + y^2} \sim \frac{E_F}{y^2}$, temos:

$$\frac{1}{i\pi} \int_{\omega_c}^{+\infty} d\omega_n \text{Re} \frac{C}{\omega_n} = \frac{C}{i\pi} \int_{\omega_c}^{+\infty} dy \text{Re} \frac{CE_F}{y^2} = \frac{CE_F}{\pi\omega_c}. \quad (\text{B.18})$$

Finalmente:

$$n = \frac{2}{\beta} \sum_{\omega_n > 0}^{\omega_c} \text{Re}G(\omega_n) + \frac{C}{2} + \frac{CE_F}{\pi\omega_c}. \quad (\text{B.19})$$

Observamos que $\omega_c \sim T$, então o número de frequências a serem somadas deve crescer conforme se baixa a temperatura. Tipicamente escolhemos somas sobre 1000 frequências, o que é um valor adequado para a escala de temperaturas consideradas nesse trabalho.

Para concluir, salienta-se que ambos os métodos aqui apresentados possuem qualidades distintas para o cálculo de ocupações. O método de cálculo via densidade de estados depende da obtenção das energias eletrônicas e seus respectivos pesos nas Funções de Green, porém ele é o único que pode ser feito à temperatura zero. Para a soma sobre frequências temos a situação inversa: ela não depende de nenhuma álgebra preliminar, mas falha para baixas temperaturas.

Apêndice C

Hamiltoniano de Heisenberg para a rede *kagome*

Conforme discutido na Introdução, as propriedades magnéticas de momentos localizados dispostos em uma rede *kagome* não são triviais. Nesse apêndice iremos alongar um pouco mais a discussão das possíveis ordens magnéticas¹ existentes nesses tipos de sistemas através do estudo do hamiltoniano de Heisenberg:

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2} \sum_{i,j} J_{ij} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j. \quad (\text{C.1})$$

Considerando inicialmente apenas interações de primeiros vizinhos, podemos escrever o hamiltoniano (C.1) com a mesma notação apresentada no Capítulo 2:

$$\mathcal{H} = \sum_{\langle i\alpha, j\beta \rangle} J_{i\alpha, j\beta}^{(1)} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j. \quad (\text{C.2})$$

A soma se restringe aos sítios $i\alpha$ e $j\beta$ que são primeiros vizinhos, cujas energias de interação são todas iguais (J^1). Por conta da existência de três sítios por célula primitiva,

¹Utilizaremos aqui uma análise baseada no método de Fourier [31].

a transformada de Fourier da interação J_{ij} apresenta três ramos distintos², que são:

$$\begin{aligned} J_1^1(\mathbf{k}) &= -2J^{(1)}, \\ J_2^1(\mathbf{k}) &= J^{(1)} \left(1 - \sqrt{\Delta(\mathbf{k})^2 - 4} \right) \quad \text{e} \\ J_3^1(\mathbf{k}) &= J^{(1)} \left(1 + \sqrt{\Delta(\mathbf{k})^2 - 4} \right). \end{aligned} \tag{C.3}$$

Quando $J^{(1)} > 0$, o mínimo de energia corresponde ao ramo não dispersivo J_1^1 , portanto não há um único vetor de onda que minimiza a energia. Para $J^{(1)} < 0$ (caso ferromagnético), o mínimo ocorre para $\mathbf{k} = 0$ e caracteriza o estado de ordem ferromagnética.

Se adicionarmos as interações de vizinhos mais distantes, a frustração deixa de existir e ordens magnéticas são estabilizadas. Podemos obter isso adicionando interações de segundos vizinhos no hamiltoniano (C.2), cujas energias serão $J^{(2)}$, e fazendo o mesmo procedimento matemático de encontrar o vetor de onda que minimiza a transformada de Fourier da interação. Agora, diferentemente de quando havia interações apenas de primeiros vizinhos, a obtenção dos ramos e o cálculo do mínimo não podem ser feitos analiticamente, dada a complexidade da equação secular para os autovalores de $J(\mathbf{q})$.

A figura C.1 exibe o diagrama de fases da situação acima. Para $J^{(1)} < 0$ a ordem ferromagnética naturalmente é preservada para $J^{(2)} < 0$ e sobrevive em uma pequena região de $J^{(2)}$ antiferromagnético (para $J^{(2)} < |J^{(1)}|/3$). Acima desse valor o mínimo passa a ser no ponto M (centro do lado do hexágono) e uma ordem magnética de 12 subredes não-coplanares é estabilizada. Esta fase é conhecida como *cuboc*, pois as orientações dos spins nas 12 subredes distintas coincidem com os vértices de um cuboctaedro [32].

Fixando $J^{(1)} > 0$, obtemos a seguinte situação: para $J^{(1)} < 0$ as interações ferromagnéticas de segundos vizinhos favorecem o aparecimento da ordem denominada $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$, enquanto que para $J^{(1)} > 0$ a ordem estabilizada é a $q = 0$. O vetor que representa a ordem $q = 0$ é o próprio $\mathbf{k} = 0$, o que demonstra que há uma magnetização máxima em cada uma das três subredes formadas pelos sítios A,B e C da base. Tal vetor é o mesmo que caracteriza a ordem FM, no entanto os dois mínimos ocorrem em ramos distintos de J e com isso conseguimos diferenciá-los. Para a fase $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ o vetor de propagação encontra-se no ponto K (vértice) do hexágono.

²Este cálculo é equivalente ao das bandas de condução da seção 2.1.

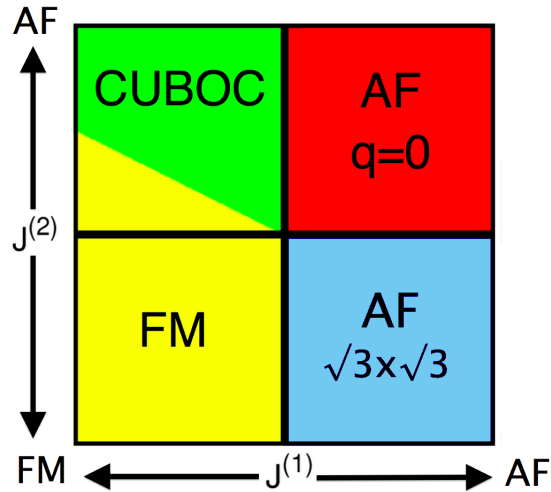


Figura C.1: Diagrama de fases para o hamiltoniano de Heisenberg com interações de primeiros e segundos vizinhos.

Na figura C.2 são exibidas as duas ordens mencionadas no parágrafo acima. Observamos que para $q = 0$ a célula primitiva magnética coincide com a da rede, tendo apenas três sítios. Nessa mesma imagem podemos observar que, dentro de cada subrede (A, B ou C), os spins tem a mesma orientação. Para $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$, a célula primitiva magnética é três vezes maior, contemplando nove sítios da rede *kagome*. Em ambos os casos observa-se que, tendo fixado um conjunto de spins com mesma orientação (representados na figura pela cor verde), é possível fazer rotações dos demais spins em torno do eixo definido por tal conjunto sem que haja qualquer variação na energia do sistema. Tais graus de liberdade da fase ordenada estão diretamente ligados à frustração, conforme vimos na Introdução desse trabalho.

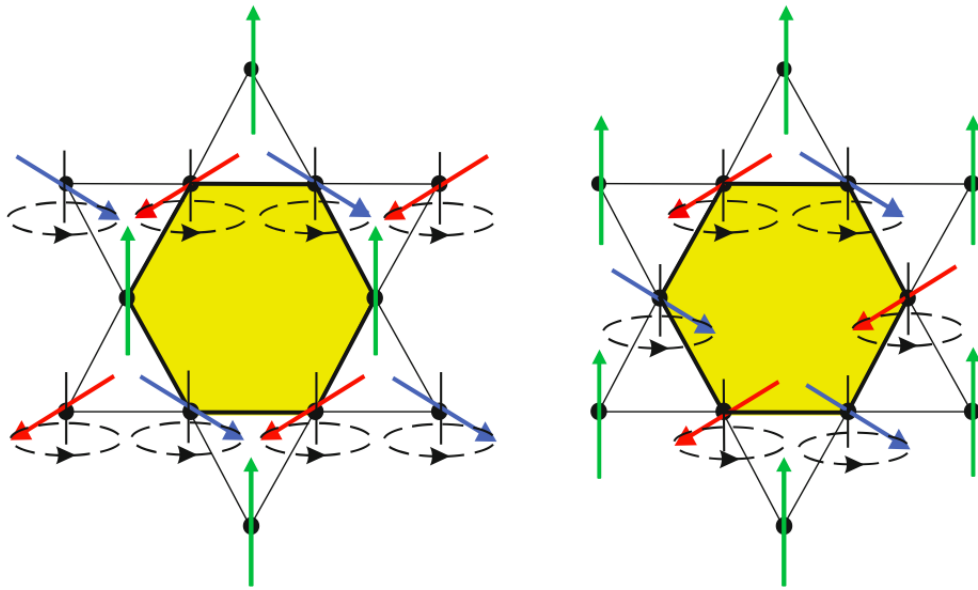


Figura C.2: **(a)**: Ordem magnética $q = 0$, favorecida por interações AF de segundos vizinhos. Em **(b)**: Ordem $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$, estabilizada por interações de segundos vizinhos FM.

Referências Bibliográficas

- [1] ANDERSON, P. W. Localized magnetic states in metals. *Physical Review*, New York, v. **124**, n. 1, p. 41–53, 1961.
- [2] SCHRIEFFER, J.; WOLFF, P. Relation between the anderson and kondo hamiltonians. *Physical Review*, New York, v. **149**, p. 491–492, 1966.
- [3] KONDO, J. Resistance minimum in dilute magnetic alloys. *Progress of Theoretical Physics*, Kyoto, v. **32**, n. 1, p. 37–49, 1964.
- [4] WILSON, K. The renormalization group: Critical phenomena and the kondo problem. *Reviews of Modern Physics*, New York, v. 47, n. 4, p. 773, 1975.
- [5] HEWSON, A. *The kondo problem to heavy fermions*. Cambridge Univ. Press, 1997. v. 2.
- [6] COLEMAN, P. Heavy fermions: Electrons at the edge of magnetism. *Handbook of Magnetism and Advanced Magnetic Materials*, 2007.
- [7] DONIACH, S. The kondo lattice and weak antiferromagnetism. *Physica B+ C*, v. **91**, p. 231–234, 1977.
- [8] HARRISON, W. *Elementary electronic structure*. World Scientific Pub Co Inc, 1999.
- [9] LACROIX, C.; MENDELS, P.; MILA, F. *Introduction to frustrated magnetism: Materials, experiments, theory*. Springer Verlag, 2011.
- [10] MOESSNER, R.; CHALKER, J. Properties of a classical spin liquid: the heisenberg pyrochlore antiferromagnet. *Physical Review Letters*, Woodbury, v. **80**, n. 13, p. 2929–2932, 1998.

- [11] BALENTS, L. Spin liquids in frustrated magnets. *Nature*, London, v. **464**, n. 7286, p. 199–208, 2010.
- [12] ANDERSON, P. The resonating valence bond state in La_2CuO_4 and superconductivity. *Science*, Washington, v. **235**, n. 4793, p. 1196–1198, 1987.
- [13] LACROIX, C. Frustrated metallic systems: A review of some peculiar behavior. *Journal of the Physical Society of Japan*, v. **79**, n. 1, p. 1008, 2010.
- [14] DRESCHER, K.; ABD-ELMEGUID, M.; MICKLITZ, H.; SANCHEZ, J.; GEIBEL, C.; STEGLICH, F. Magnetic frustration in the antiferromagnetic kondo lattice YbPtAl : Anomalous magnetic behavior at high pressures. *Journal of magnetism and magnetic materials*, v. **182**, n. 3, p. L275–L279, 1998.
- [15] FÁK, B.; MCMORROW, D.; NIKLOWITZ, P.; RAYMOND, S.; RESSOUCHE, E.; FLOUQUET, J.; CANFIELD, P.; BUD'KO, S.; JANSSEN, Y.; GUTMANN, M. An inelastic neutron scattering study of single-crystal heavy-fermion YbAgGe . *Journal of Physics: Condensed Matter*, Bristol, v. **17**, p. 301, 2005.
- [16] SENGUPTA, K.; FORTHAUS, M.; KUBO, H.; KATOH, K.; UMEO, K.; TAKABATAKE, T.; ABD-ELMEGUID, M. Geometrical frustration versus magnetic order in the heavy-fermion antiferromagnet YbAgGe under high pressure. *Physical Review B*, v. **81**, n. 12, p. 125129, 2010.
- [17] UMEO, K.; YAMANE, K.; MURO, Y.; KATOH, K.; NIIDE, Y.; OCHIAI, A.; TAKABATAKE, T. Pressure effect on successive magnetic transitions in a frustrated compound YbAgGe . *Physica B: Condensed Matter*, v. **359**, p. 130–132, 2005.
- [18] IGLESIAS, J. R.; LACROIX, C.; COQBLIN, B. Revisited doniach diagram: Influence of short-range antiferromagnetic correlations in the kondo lattice. *Physical Review B*, v. **56**, n. 18, p. 11820, 1997.
- [19] BERNHARD, B. H.; COQBLIN, B.; LACROIX, C. Frustration in the kondo lattice model: Local versus extended singlet phases. *Physical Review B*, v. **83**, n. 21, p. 214427, 2011.

- [20] NETO, A.; GUINEA, F.; PERES, N.; NOVOSELOV, K.; GEIM, A. The electronic properties of graphene. *Reviews of Modern Physics*, Woodbury, v. **81**, n. 1, p. 109, 2009.
- [21] RUPPENTHAL, A. R.; IGLESIAS, J. R.; GUSMÃO, M. A. Effect of band filling in the kondo lattice: A mean-field approach. *Physical Review B*, v. **60**, p. 7321–7327, Sep 1999.
- [22] MOTOME, Y.; NAKAMIKAWA, K.; YAMAJI, Y.; UDAGAWA, M. Variational monte carlo study of the kondo necklace model with geometrical frustration. *Journal of the Physical Society of Japan*, v. **80**, n. Supplement A, p. SA133, 2011.
- [23] MEKATA, M. Antiferro-ferrimagnetic transition in triangular ising lattice. *Journal of the Physical Society of Japan*, v. **42**, n. 1, p. 76–82, 1977.
- [24] MOTOME, Y.; NAKAMIKAWA, K.; YAMAJI, Y.; UDAGAWA, M. Partial kondo screening in frustrated kondo lattice systems. *Physical Review Letters*, Woodbury, v. **105**, n. 3, p. 36403, 2010.
- [25] COQBLIN, B.; GUSMÃO, M.; IGLESIAS, J.; RUPPENTHAL, A.; LACROIX, C. Competition between magnetic order and kondo effect in cerium compounds. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, Amsterdam, v. **226**, p. 115–117, 2001.
- [26] NOZIÈRES, P. Impuretés magnétiques et effet kondo. *Annales de Physique Française*, v. **10**, n. 1, p. 19–35, 1985.
- [27] CHADI, D.; COHEN, M. Special points in the brillouin zone. *Physical Review B*, v. **8**, n. 12, p. 5747, 1973.
- [28] CUNNINGHAM, S. Special points in the two-dimensional brillouin zone. *Physical Review B*, v. **10**, p. 4988–4994, 1974.
- [29] ABRIKOSOV, A.; GORKOV, L.; DZIALOSHINSKI, I. *Methods of quantum field theory in statistical physics*. Dover Pubns, 1975.
- [30] MAHAN, G. *Many-particle physics*. Springer, 2000.

- [31] BERTAUT, E. Configurations magnétiques: Méthode de fourier. *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, v. **21**, n. 3, p. 256–279, 1961.
- [32] DOMENGE, J.-C.; SINDZINGRE, P.; LHUILLIER, C.; PIERRE, L. Twelve sublattice ordered phase in the J_1 - J_2 model on the kagomé lattice. *Physical Review B*, v. **72**, p. 024433, Jul 2005.