



Serviço Público Federal
Ministério da Educação
Fundação Universidade Federal de Mato Grosso do Sul



Curso de Física - Bacharelado

Interação Kondo e seu Impacto na Frustração

João Augusto Ribeiro dos Santos
Orientador: Prof. Dr. Fábio Mallmann Zimmer

Campo Grande - MS
2024

INSTITUTO DE FÍSICA- INFI

Cidade Universitária|Unidade 5|
Fone (67) 3345 7485
79070-900 | Campo Grande | MS



Serviço Público Federal
Ministério da Educação
Fundação Universidade Federal de Mato Grosso do Sul



Curso de Física - Bacharelado

Interação Kondo e seu Impacto na Frustração

João Augusto Ribeiro dos Santos

Orientador: Prof. Dr. Fábio Mallmann Zimmer

**Trabalho de conclusão de curso apresentado
à Universidade Federal de Mato Grosso Sul
- UFMS - Instituto de Física, para obtenção
do título de bacharel em Física.**

**Campo Grande - MS
2024**

INSTITUTO DE FÍSICA- INFI

Cidade Universitária|Unidade 5|
Fone (67) 3345 7485
79070-900 | Campo Grande | MS

Interação Kondo e seu Impacto na Frustração

João Augusto Ribeiro dos Santos

Trabalho de conclusão de curso apresentado à banca examinadora do Instituto de Física da Universidade Federal de Mato Grosso do Sul - INFI/UFMS, como requisito parcial para obtenção do título de Bacharel em Física.

Prof. Dr. Fábio Mallmann Zimmer - UFMS

Prof. Dr. João Vitor Batista Ferreira - UFMS

Mestre Arthur Krindges - UFPEL

Prof. Victor Fidelis Fernandes - UFMS

Campo Grande - MS
2024

Agradecimentos

Agradeço aos meus pais Fabíola e Eli, a minha vó Dona Nora, por terem me dado todo o apoio e suporte para meu desenvolvimento, não só durante a graduação mas por toda a minha vida.

Agradeço a minha namorada, Emmanuelle, por ter me dado todo seu apoio, motivação e compreensão, me dando forças para buscar meus objetivos.

Agradeço a todos os professores e funcionários do INFI, em especial aos professores que tive aulas, os quais me proporcionaram diversas maneiras de pensar e resolver problemas na física, na ciência e até na vida.

Agradeço ao professor Fábio, que gastou tempo e energia para me orientar na iniciação científica e em toda a graduação presencial, me indicando os caminhos pelos quais eu pude aprender e me aprimorar, e além disso, agradeço pelo seu grande senso de humanidade.

Agradeço aos meus colegas alunos do INFI, que durante minha graduação compartilharam risadas, dúvidas das matérias e também me auxiliaram a superar diversos desafios na graduação.

Agradeço ao CNPq e a Fundect, instituições de fomento que apoiaram minha iniciação científica durante a maior parte da minha graduação. Também agradeço ao povo brasileiro, o qual financia essas instituições.

Resumo

Diversos estudos em física estão interessados em comportamentos magnéticos dos materiais, por exemplo o efeito magnetocalórico e transições de fase, os quais podem ser estudados em sistemas com frustração geométrica. A frustração em um sistema magnético acontece quando não é possível minimizar todas as contribuições para a energia potencial simultaneamente, em particular, quando a causa disso for a geometria da rede de spins, tal situação ganha o nome de frustração geométrica (FG), gerando assim contribuições interessantes para diversas áreas, como as redes neurais. Além disso, também é de interesse a interação Kondo, a qual contribui nas áreas de férmions pesados e pontos quânticos. O efeito Kondo acontece quando há blindagem dos momentos localizados devido ao acoplamento entre os spins dos elétrons de condução e dos elétrons localizados, o que pode afetar as interações frustradas. Portanto, foi tomado como objetivo estudar o que pode acontecer com uma rede frustrada na presença de interação Kondo. Para isso, foi adotado como modelo uma rede triangular com elétrons de condução que realizam a interação Kondo (K_{AF}) e interações antiferromagnéticas (AF) anisotrópicas entre spins primeiros vizinhos de elétrons localizados, as quais levam a FG. Para resolução desse problema foi utilizado a Teoria de Campo Médio com Clusters, em que o sistema efetivo é um cluster triangular de três sítios de spin com um único elétron de condução. O hamiltoniano desse sistema efetivo é descrito por uma parte de interações intracluster (resolvido por Diagonalização exata) e outra entre clusters, essa última aproximada por campos médios que levam a equações autoconsistentes. Em baixas temperaturas ($T = 0.05$) a FG domina sob os efeitos das flutuações térmicas, assim fazendo com que o sistema apresente uma fase AF frustrada, mas ao aumentar a T apresenta uma transição para a fase paramagnética, em que a temperatura crítica aumenta com a intensidade do parâmetro de troca J_{AF} , e diminui com o aumento de K_{AF} , assim evidenciando o caráter competitivo entre esses dois parâmetros e a temperatura.

Palavras chave: Frustração geométrica, Modelo de Ising, Interação Kondo, transição de fase, antiferromagnetismo.

Abstract

Several studies in physics are interested in the magnetic behaviors of materials, for example the magnetocaloric effect and phase transitions, which can be studied in systems with geometric spin frustration. Frustration in a magnetic system occurs when it is not possible to minimize all contributions to potential energy simultaneously, in particular, when the cause of this is the geometry of the spin lattice, such a situation is called geometric frustration (FG), thus generating interesting contributions to several areas, such as neural networks. Furthermore, the Kondo interaction is also of interest, which contributes in the areas of heavy fermions and quantum dots. The Kondo effect occurs when there is shielding of localized moments due to the coupling between the spins of conduction electrons and localized electrons, which can affect frustrated interactions. Therefore, the objective was to study what can happen to a frustrated lattice in the presence of Kondo interaction. For this purpose, a triangular lattice was adopted as a model with conduction electrons that perform the Kondo interaction, and anisotropic antiferromagnetic (AF) interactions between neighboring first spins of localized electrons, which lead to FG. To solve this problem, Mean Field Theory with Clusters was used, in which the effective system is a triangular cluster of three spin sites with a single conduction electron. The Hamiltonian of this effective system is described by a part of intra-cluster interactions (solved by exact Diagonalization) and another between clusters, the latter approximated by mean fields that lead to self-consistent equations. At low temperatures ($T = 0.05$) the FG dominates under the effects of thermal fluctuations, thus causing the system to present a frustrated AF phase, but when increasing T it presents a transition to the paramagnetic phase, in which the critical temperature increases with the intensity of the exchange parameter J_{AF} , and decreases with the increase in K_{AF} , thus highlighting the competitive nature between these two parameters and temperature.

Keywords: Geometrical Frustration, Ising Model, Kondo interaction, phase transition, antiferromagnetism.

Sumário

1	Introdução	1
1.1	Motivações	1
1.2	Objetivos	2
1.3	Metodologia	2
1.4	Estrutura do Trabalho	3
2	Sistemas Magnéticos	4
2.1	Transição de fase em sistemas físicos	4
2.2	Interação de troca	5
2.3	Ordenamento Magnético	9
2.4	Frustração Geométrica	10
2.5	Efeito Kondo	11
3	Modelos e Métodos	13
3.1	Modelo de Ising	13
3.2	Modelo de Heisenberg	14
3.2.1	Interação Kondo no Modelo de Heisenberg	15
3.3	Média Térmica e Diagonalização Exata	16
3.4	Teoria de Campo Médio com Clusters	17
4	Abordagens específicas do trabalho	20
4.1	Interação Kondo em Cluster Triangular anisotrópico	21
4.2	Representação Computacional dos Estados da Base	22
4.3	Abordagem Numérica para interações dentro do Cluster	23
4.3.1	Interação de troca	23
4.3.2	Termo de salto	24
4.3.3	Interação Kondo	24
4.4	Cálculo da Magnetização	25
4.5	Abordagem Numérica para TCMC Triangular	25
5	Resultados e Discussões	28

Capítulo 1

Introdução

1.1 Motivações

Sistemas magnéticos frustrados tem sido de extrema importância na compreensão de diversas áreas da física, como na supercondutividade [1], em redes neurais [2] [3] e na refrigeração magnética via efeito magnetocalórico [4] [5]. A frustração se refere à competição das interações entre spins, o que leva à incapacidade de minimizar a energia para todos os pares de momentos magnéticos simultaneamente. Esse fenômeno pode ser causado pela geometria da rede, por interações competitivas entre primeiros e segundos vizinhos, ou pelo fenômeno de desordem que gera alternância entre as interações ferromagnéticas e antiferromagnéticas entre os spins. Como exemplo de frustração devido a geometria da rede (geométrica) [6, 7], tem-se o caso das redes kagomé e triangular bidimensionais com spins de Ising em interações antiferromagnéticas entre vizinhos mais próximos. A frustração possui uma característica central que é levar o sistema a ter um alto número de estados de mínima energia como candidatos a representarem o estado fundamental [3], ou seja, grande degenerescência do estado fundamental, o que é necessário para o aparecimento de algumas novas fases magnéticas, como o líquido de spin e o vidro de spin [8].

O acoplamento Kondo, que é a blindagem de momentos magnéticos localizados devido ao acoplamento entre os spins dos elétrons de condução com os spins dos elétrons localizados, tem impulsionado o desenvolvimento de áreas de pesquisa como o de sistemas fortemente correlacionados [9] e de semicondutores, principalmente em pontos quânticos [9, 10].

Quando o acoplamento Kondo e a frustração geométrica podem ocorrer em um sistema, é possível que a blindagem de momentos magnéticos localizados afete as interações competitivas entre os spins dos elétrons da rede (ou

cluster), pois essa blindagem poderá interferir em como os momentos magnéticos interagem entre si, introduzindo uma competição adicional ao problema frustrado.

Combinar a interação Kondo com a Frustração já acarretou em maior compreensão da física no ramo da matéria condensada [7, 11], mas ainda há muito o que ser compreendido sobre a natureza física desses fenômenos e as fases magnéticas nas quais eles estão presentes. Por exemplo, essa combinação poderia ser explorada como uma possível aplicação de magnetos frustrados no controle das propriedades eletrônicas, por meio da manipulação das estruturas magnéticas. O acoplamento entre os spins frustrados e outros graus de liberdade também poderia fornecer uma base para o desenvolvimento de novos materiais multifuncionais, nos quais as propriedades eletrônicas podem ser controladas por diversas variáveis externas, como um campo magnético aplicado e a pressão exercida sobre o material [12]. Assim, a compreensão da relação entre frustração e interação Kondo pode ser de grande importância, tanto do ponto de vista teórico quanto para possíveis aplicações tecnológicas.

1.2 Objetivos

Este trabalho tem como objetivo estudar como a interação Kondo pode afetar o comportamento magnético causado pela frustração geométrica em um sistema.

De maneira mais específica pretende-se observar o que acontece com a temperatura de transição entre o estado paramagnético e o antiferromagnético, principalmente na presença de interações frustradas advindas de uma rede triangular com interação de troca antiferromagnética. Para tal, foram feitos cálculos computacionais através de métodos numéricos as magnetizações de cada sítio de spin para diferentes temperaturas, assim buscando transições de fase nesse sistema e suas temperaturas críticas.

1.3 Metodologia

Para atingir os objetivos citados, é considerado um modelo com spins localizados com interações de troca antiferromagnéticas em uma estrutura de rede triangular. Além disso, o modelo inclui elétrons itinerantes que podem interagir antiferromagneticamente com os momentos localizados por meio da interação Kondo. Portanto, o modelo possui três termos principais: um termo de energia cinética (“hopping”), um termo de interação de troca entre momentos localizados (que é anisotrópica e só apresenta a componente z ,

ou seja, Ising), e, por fim, a interação Kondo. Esse modelo é estudado utilizando métodos da mecânica estatística, adotando a técnica de campo médio com clusters para tratar as interações magnéticas entre os momentos localizados de clusters vizinhos. A rede é dividida em triângulos com três sítios, onde as interações entre os clusters são representadas por campos médios auto-consistentes. Em cada cluster, considera-se um único elétron de condução que interage via a interação Kondo com os momentos localizados. O problema do cluster efetivo de três sítios, que substitui o sistema original, é então resolvido através de métodos de diagonalização exata. Em resumo, a obtenção dos resultados é feita através dos métodos de diagonalização exata e teoria de campo médio com clusters (TCMC), sendo o primeiro responsável por resolver exatamente as interações intra-cluster e o segundo por fazer aproximações para lidar com os campos médios devidos as interações fora do cluster.

Após o tratamento analítico, são implementadas por meio de métodos computacionais a diagonalização exata e a solução auto-consistente, utilizando um algoritmo desenvolvido e escrito em linguagem de programação Fortran. Os resultados numéricos são apresentados em gráficos, que são então interpretados para entender as propriedades físicas do sistema, como as transições de fase magnética em função dos parâmetros J e K , os quais estão associados respectivamente as interações de troca e a interação Kondo.

1.4 Estrutura do Trabalho

O restante do trabalho está dividido em três “blocos”. O primeiro inclui os Capítulos 2 e 3 que trarão uma breve discussão e levantamento bibliográfico sobre os sistemas, modelos e fenômenos utilizados nessa monografia. O segundo possui somente o Capítulo 4, o qual apresenta as particularidades do trabalho, como o desenvolvimento teórico e a lógica computacional desenvolvida para geração dos resultados. E por fim, o terceiro bloco que inclui os Capítulos 5 e 6, em que o Capítulo 5 exibirá e discutirá os resultados obtidos, e finalmente o Capítulo 6 apresentará as conclusões sobre todo o contexto abordado.

Capítulo 2

Sistemas Magnéticos

2.1 Transição de fase em sistemas físicos

Na natureza nenhuma matéria macroscópica mantém exatamente as mesmas características independentes das condições do meio a qual ela está, um claro exemplo disso é a água que a depender da temperatura e pressão pode apresentar diferentes estados da matéria, como o sólido, o líquido e o gasoso, assim modificando diversas das suas características físicas de maneira tão radical ao ponto de que se não fosse simples de se observar a água sofrendo a transição entre esses estados seria extremamente difícil convencer alguém que elas são feitas do mesmo ente (H_2O).

As ordens magnéticas resultam das interações microscópicas entre os momentos magnéticos de spin, que estão associados aos elétrons nos átomos. Esses momentos magnéticos interagem entre si por meio de forças de troca, como a interação de troca de Heisenberg (discutida na Seção 2.2), que pode ser ferromagnética (tendem a alinhar os spins na mesma direção e mesmo sentido) ou antiferromagnética (tendem a alinhar os spins em sentidos opostos). Essas tendências de alinhamento podem favorecer o aparecimento de ordens de longo alcance, ou fases magnéticas, como o ferromagnetismo (FM) ou o antiferromagnetismo (AF¹), discutidas na seção 2.3.

Do ponto de vista termodinâmico, uma fase é caracterizada por uma função termodinâmica. Em geral, a energia livre que depende de diversos parâmetros macroscópicos, que podem ser intensivos ou extensivos. No entanto, muitas vezes se dá preferência àqueles que se enquadram como parâmetros de ordem, os quais são, em sua maioria, quantidades físicas intensivas capazes de mensurar o grau de ordenamento (ou similaridade) dos componentes

¹Dentro dessa monografia a sigla AF também é usada no sentido de fase antiferromagnética ou interação antiferromagnética.

microscópicos do sistema, como, por exemplo, a magnetização [13] [14].

A transição de fase é marcada pela mudança drástica nas propriedades macroscópicas, que se traduz na presença de uma singularidade em funções que representam as quantidades físicas do sistema. Quando tal singularidade se apresenta como uma descontinuidade ou divergência, ela é dita como sendo uma transição de primeira ordem, já quando ela aparece como sendo um valor nulo para o parâmetro de ordem durante uma região e sendo não nula em outra região, ela é chamada de transição de segunda ordem. Essas diferentes ordens estão ilustradas nos gráficos da Figura 2.1.

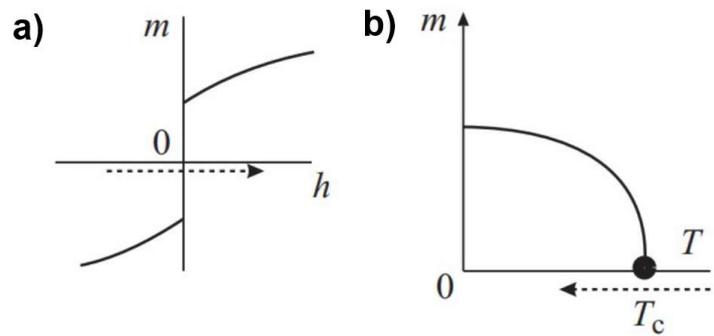


Figura 2.1: Diagramas de fase para **(a)** Transição de fase de primeira ordem, magnetização (m) em função do campo magnético (h). **(b)** Transição de fase de segunda ordem, m em função da temperatura (T). Fonte: [14].

Note que na Figura 2.1(a) a magnetização com o aumento do campo magnético aplicado apresenta uma descontinuidade em zero, exibindo uma transição de primeira ordem quando ocorre a mudança de sinal no campo aplicado, assim mudando o sentido da magnetização do sistema. Já na Figura 2.1(b) a magnetização é zero para temperaturas altas. Ao diminuir a temperatura, tem-se um aumento contínuo da magnetização para temperaturas menores que a temperatura crítica (T_c), onde $m > 0$, portanto, trata-se de uma transição de segunda ordem.

2.2 Interação de troca

A interação de troca é a responsável pelo ordenamento magnético da matéria, ela surge devido a repulsão coulombiana entre dois elétrons vizinhos combinado com o princípio de exclusão de Pauli [13]. Elétrons são indistinguíveis entre si, portanto caso eles possam trocar de posição deve-se obter a mesma densidade de probabilidade para antes e depois da troca: $|\Psi(1, 2)|^2 = |\Psi(2, 1)|^2$, sendo $\Psi(1, 2)$ a função de onda total a qual é solução

da equação de Schrödinger, para o elétron 1 na posição \vec{r}_1 e o elétron 2 na posição \vec{r}_2 e $\Psi(2, 1)$ sendo a sua permutação, tal que:

$$\Psi(1, 2) = \phi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)\chi(s_1, s_2), \quad (2.1)$$

sendo $\phi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ a função de onda espacial para as posições \vec{r}_1 e \vec{r}_2 , e $\chi(s_1, s_2)$ a função de onda de spin com coordenadas de spin s_1 e s_2 . Como elétrons são férmions, a única solução possível é a antissimétrica [13] [15]:

$$\Psi(1, 2) = -\Psi(2, 1), \quad (2.2)$$

ou seja, há duas alternativas para a função antissimétrica total:

$$\Psi_A(1, 2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{cases} \phi_S(\vec{r}_1, \vec{r}_2)\chi_A(s_1, s_2) \\ \phi_A(\vec{r}_1, \vec{r}_2)\chi_S(s_1, s_2) \end{cases},$$

em que $\frac{1}{\sqrt{2}}$ é para normalizar as funções e os subíndices S e A indicam, respectivamente, as soluções simétricas e antissimétricas para as diferentes funções de onda.

Para melhor compreensão dessa solução é interessante discutir cada uma das soluções individuais. Para dois elétrons, denominados por 1 e 2, as possíveis soluções a função posição são:

$$\phi_S(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \phi_1(\vec{r}_1)\phi_2(\vec{r}_2) + \phi_1(\vec{r}_2)\phi_2(\vec{r}_1) \quad (2.3)$$

e

$$\phi_S(\vec{r}_2, \vec{r}_1) = \phi_1(\vec{r}_2)\phi_2(\vec{r}_1) + \phi_1(\vec{r}_1)\phi_2(\vec{r}_2). \quad (2.4)$$

Logo,

$$\phi_S(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \phi_S(\vec{r}_2, \vec{r}_1), \quad (2.5)$$

com

$$\phi_A(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \phi_1(\vec{r}_1)\phi_2(\vec{r}_2) - \phi_1(\vec{r}_2)\phi_2(\vec{r}_1), \quad (2.6)$$

e

$$\phi_A(\vec{r}_2, \vec{r}_1) = \phi_1(\vec{r}_2)\phi_2(\vec{r}_1) - \phi_1(\vec{r}_1)\phi_2(\vec{r}_2), \quad (2.7)$$

então:

$$\phi_A(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = -\phi_A(\vec{r}_2, \vec{r}_1). \quad (2.8)$$

Agora, para explicitar as soluções para a função de onda de coordenada de spin é necessário ressaltar que por convenção tem-se:

$$\hat{S}_Z\chi_\alpha(s_1) = \frac{\hbar}{2}\chi_\alpha(s_1), \quad (2.9)$$

$$\hat{S}_Z \chi_\beta(s_1) = \frac{-\hbar}{2} \chi_\beta(s_1). \quad (2.10)$$

Para um sistema de dois elétrons há quatro soluções possíveis, pois há quatro estados da base, essas soluções são os autoestados do operador Hamiltoniano de Heisenberg, em que para a solução antissimétrica há somente uma resposta:

$$\chi_A(s_1, s_2) = \chi_\alpha(s_1)\chi_\beta(s_2) - \chi_\alpha(s_2)\chi_\beta(s_1) = -\chi_S(s_2, s_1). \quad (2.11)$$

Tal situação é conhecida como singlete. Já para a função simétrica há três soluções possíveis (triplete):

$$\chi_S(s_1, s_2) = \chi_\alpha(s_1)\chi_\beta(s_2) + \chi_\alpha(s_2)\chi_\beta(s_1) = \chi_S(s_2, s_1), \quad (2.12)$$

$$\chi_S(s_1, s_2) = \chi_\alpha(s_1)\chi_\alpha(s_2) = \chi_S(s_2, s_1), \quad (2.13)$$

e

$$\chi_S(s_1, s_2) = \chi_\beta(s_1)\chi_\beta(s_2) = \chi_S(s_2, s_1). \quad (2.14)$$

Assim, o singlete representa o estado em que os spins estão anti-alinhados ($S = 0$) e o triplete o estado em que de spins estão alinhados ($S = 1$). Juntando essa informação com a função espacial percebe-se que os elétrons só podem ocupar a mesma região do espaço quando os spins estiverem desemparelhados, ou seja, quando a solução espacial for simétrica, a de spins precisa ser antissimétrica para então respeitar o princípio de exclusão de Pauli, e continuar respeitando a solução antissimétrica de férmions. A solução espacial só será antissimétrica quando houver o triplete (e vice-versa). A Figura 2.2 ilustra essa situação de maneira mais intuitiva, pois na representação do singlete não há intersecção entre as funções de ondas espaciais dos elétrons, as funções de onda só possuem uma região em comum para o triplete.

Note que em nenhum momento foi dado uma representação exata de quais sistemas essas soluções atendem, portanto elas são genéricas e contemplam quaisquer sistemas de dois elétrons. Considere uma molécula diatômica em que cada átomo possui um elétron com a seguinte energia potencial coulombiana para os dois elétrons do sistema:

$$U(r_1, r_2) = U_1(r_1) + U_2(r_2) + U_{12}(r_{12}), \quad (2.15)$$

$$r_{12} = |r_1 - r_2|, \quad (2.16)$$

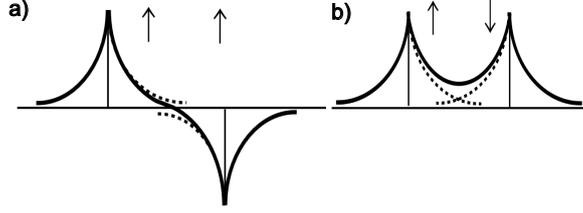


Figura 2.2: Função de onda espacial em função da posição para (a) Solução antissimétrica com spins alinhados (triplete) e (b) Solução simétrica com spins anti-alinhados (singleto). Fonte: [13].

sendo os dois primeiros termos da energia referentes à energia de interação dos elétrons com os núcleos e o último termo a energia de repulsão elétron-elétron. Para obter o valor esperado da energia do sistema será necessário somente das soluções da função espacial, uma vez que os spins não influenciam na energia eletrostática, então segue que:

$$\langle U \rangle = \int \int \psi_{\pm}^* U \psi_{\pm} d^3 r_1 d^3 r_2. \quad (2.17)$$

Substituindo ψ_{\pm} por:

$$\psi_{\pm} = \frac{1}{\sqrt{2}} [\phi_1(\vec{r}_1) \phi_2(\vec{r}_2) \pm \phi_1(\vec{r}_2) \phi_2(\vec{r}_1)], \quad (2.18)$$

chega-se em:

$$\langle U \rangle = E_1 + E_2 + E_{12} \pm J_{12}, \quad (2.19)$$

sendo

$$E_1 = \frac{1}{2} \langle \phi_1(\vec{r}_1) | U_1 | \phi_1(\vec{r}_1) \rangle, \quad (2.20)$$

$$E_2 = \frac{1}{2} \langle \phi_2(\vec{r}_2) | U_2 | \phi_2(\vec{r}_2) \rangle, \quad (2.21)$$

$$E_{12} = \langle \phi_1(\vec{r}_1) \phi_2(\vec{r}_2) | U_{12} | \phi_1(\vec{r}_1) \phi_2(\vec{r}_2) \rangle, \quad (2.22)$$

e

$$J_{12} = \langle \phi_2(\vec{r}_1) \phi_1(\vec{r}_2) | U_{12} | \phi_1(\vec{r}_1) \phi_2(\vec{r}_2) \rangle. \quad (2.23)$$

O sinal de + em frente ao J_{12} e no subíndice de ψ refere-se a solução simétrica espacial (singleto) e o - a solução antissimétrica espacial (triplete).

Percebe-se que entre o estado singleto e triplete a única energia que mudar é J_{12} (conhecida como energia de troca [16]), portanto a diferença de energia entre os dois estados é:

$$\Delta E = E_{\text{singleto}} - E_{\text{tripleto}} = 2J_{12}. \quad (2.24)$$

Se $J_{12} > 0$, significa que $E_t < E_s$, logo o estado de menor energia é o ferromagnético. Já para $J_{12} < 0$, tem-se que $E_t > E_s$, logo o estado de menor energia é o antiferromagnético. Ainda existe o caso $J_{12} = 0$, em que não há favorecimento nem do ferromagnetismo nem do antiferromagnetismo, caracterizando um estado paramagnético, uma vez que $E_t = E_s$ [13] [17] [18].

A interação de troca é consequência direta da interação coulombiana mas se relaciona indiretamente com os alinhamentos dos spins, então é possível atribuir o sinal \pm aos spins, de modo que a energia de troca pode ser representada pelo seguinte Hamiltoniano:

$$H_{\text{troca}} = J_{12} \left(\frac{1}{2} + \frac{2\langle \vec{S}_1 \vec{S}_2 \rangle}{\hbar^2} \right), \quad (2.25)$$

lembrando que:

$$2\vec{S}_1 \vec{S}_2 = (\vec{S}_1 + \vec{S}_2)^2 - (\vec{S}_1)^2 - (\vec{S}_2)^2. \quad (2.26)$$

No Capítulo 3 será mostrado como fica o Hamiltoniano de troca para um sistema de vários spins.

2.3 Ordenamento Magnético

Quando se trata de estudar materiais magnéticos é indispensável compreender as fases magnéticas que os compõem, algumas das mais famosas são as fases paramagnética, ferromagnética e o antiferromagnética, as quais serão apresentadas adiante, mas também há as menos conhecidas como o vidro de spin e o líquido de spin.

A respeito do paramagnetismo (PM), o físico francês Paul Langevin diz qualitativamente em sua teoria que todos os átomos ou moléculas de um paramagneto possuem um mesmo momento magnético líquido que na ausência de campo magnético externo eles apontam em direções aleatórias, e, como não há orientação preferencial, tais momentos se anulam resultado em magnetização zero. Porém, ao aplicar um campo magnético externo, esses momentos se alinham na direção do campo magnético aplicado, fazendo com que o material adquira um momento magnético total diferente de zero [19]. Entretanto, as agitações térmicas das partículas geram uma tendência de manter os momentos atômicos apontando em direções aleatórias, o que minimiza ou anula tais efeitos do campo magnético a temperaturas suficientemente altas [19].

Na década de 30, alguns físicos como Dirac e Heisenberg propuseram a interação de troca para explicar a existência de materiais ferromagnéticos [20]. Posto de outra forma, em temperaturas suficientemente altas, as direções dos spins se mantêm aleatórias, mas ao resfriar o material encontra-se um estágio em que a interação de troca (para $J > 0$) supera a energia térmica, e o material passa a apresentar uma magnetização não nula. A temperatura em que essa transição ocorre é chamada de Temperatura de Curie (T_C).

O antiferromagnetismo possui um ordenamento dos momentos magnéticos que não é aleatório e, ao mesmo tempo, possui magnetização espontânea nula. Em termos da interação de troca, o AF se dá para $J < 0$, em que os spins vizinhos têm a tendência de ficarem anti-alinhados. Assim como no FM, quando o material tem temperatura alta as agitações térmicas levam ao PM, mas ao diminuí-la o carácter AF aparece de mesmo modo como para materiais FM, porém nesse caso a temperatura crítica é conhecida como Temperatura de Néel (T_N).

Além do FE e AF, existem outras formas de ordenamento magnético que podem surgir das interações de troca. Um caso interessante ocorre quando essas interações competem entre si, gerando frustração. A frustração, em particular a frustração geométrica, pode dificultar ou até mesmo impedir o estabelecimento de um ordenamento magnético, por isso ela é discutida em uma seção separada.

2.4 Frustração Geométrica

A frustração geométrica (FG) é um tipo de frustração em que o motivo da incapacidade de minimizar a energia para todos os pares de spins é a geometria do sistema, tal frustração também leva a degenerescência do estado fundamental. As interações ferromagnéticas são facilmente satisfeitas em qualquer tipo de estrutura de rede, porém quando se trata de interações antiferromagnéticas existe um caso em que é impossível atingir essa condição, tal cenário é quando existe um número ímpar de spins na célula unitária [13].

Em casos em que essa interação antiferromagnética é somente com primeiros vizinhos (chamada J_1), clusters com números ímpares de sítios de spins apresentam frustração ao não conseguirem manter todos os spins anti-alinhados ao mesmo tempo, como ilustra a Figura 2.3.a). Já, quando se tem um número par de sítios, não há dificuldades em alcançar tal condição. Porém, ao considerar interações entre primeiros e segundos vizinhos (J_2), representadas na Figura 2.3.b), clusters com número par de sítios pode apresentar frustração devido ao fato que a célula unitária passou a possuir um número ímpar de spins.

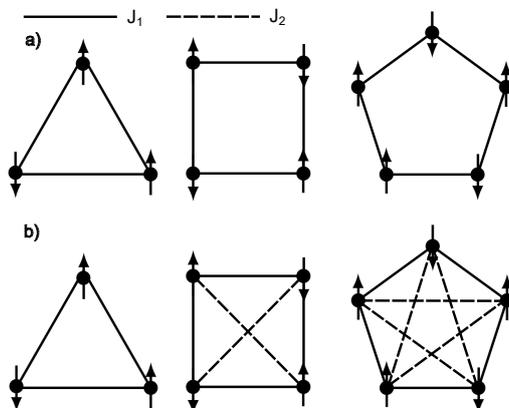


Figura 2.3: Clusters com interações AF para (a) primeiros vizinhos (b) segundos vizinhos. Fonte: [13] modificado.

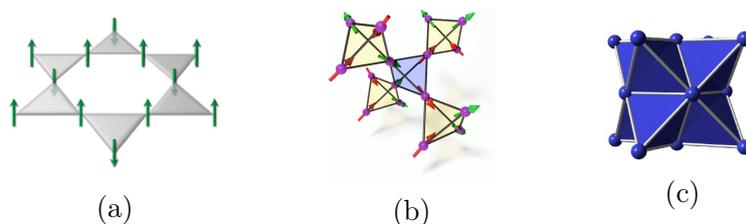


Figura 2.4: Redes (a) kagomé [21], (b) pirocloro [22] e (c) cúbica de face centrada [23].

Além de estruturas de polígonos regulares, a FG acontece também em outros tipos de moléculas como é o caso da rede kagomé (Figura 2.4.a), ou quando se trata de moléculas tridimensionais há a rede pirocloro (Figura 2.4.b) e a rede cúbica de face centrada (Figura 2.4.c), em que todas as células unitárias são formadas por polígonos com número ímpar de vértices.

2.5 Efeito Kondo

Em meados de 1930 físicos experimentais se depararam com um resultado inesperado ao estudarem a relação entre resistência elétrica e temperatura, em metais puros como chumbo, nióbio e alumínio. A diminuição de temperatura leva a perda total da resistência elétrica desses materiais, assim os tornando supercondutores. Já, outros metais como cobre e ouro, ao serem submetidos as mesmas condições não atingem o estado de supercondutividade e apresentam uma saturação de sua resistência, porém quando se adiciona

impurezas magnéticas nesses metais o cenário é outro, conforme a temperatura é reduzida a resistência elétrica também reduz, entretanto, ao atingir uma certa temperatura (temperatura de Kondo), a resistência elétrica começa a subir [24]. Tal comportamento só foi esclarecido em 1964 pelo físico japonês Jun Kondo. Ele explicou o fenômeno através da interação entre o spin da impureza magnética e do spin do elétron de condução, gerando assim um espalhamento do elétron de condução [24] ou um acoplamento entre esses momentos [25]. Tais comportamentos estão representados na Figura 2.5

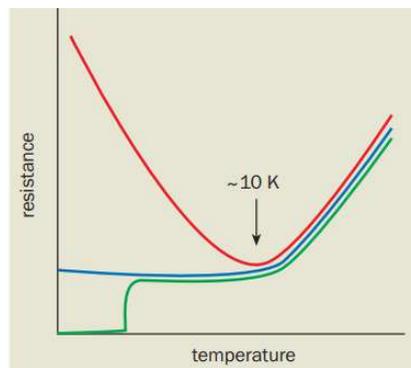


Figura 2.5: Resistência elétrica em função da temperatura para um metal supercondutor (verde), para um metal com saturação da resistência (azul) e para um metal impuro com temperatura de Kondo (vermelho).

Nos primeiros momentos da descoberta do efeito Kondo, ele foi observado a baixas temperaturas, cerca de 3 Kelvin [24]. Porém, há trabalhos recentes que o encontram em temperaturas bem maiores, no alcance de 500-1000 Kelvin [26], mas que devido à complexidade envolvida ainda precisam de mais estudos para serem testados e completamente compreendidos pela comunidade científica.

Capítulo 3

Modelos e Métodos

Em mecânica quântica é de extrema importância o conhecimento do hamiltoniano do sistema estudado, e felizmente há diversos sistemas magnéticos que permitem a sua descrição através de um hamiltoniano relativamente simples, como o modelo de Ising.

3.1 Modelo de Ising

No modelo de Ising, o seu hamiltoniano é utilizado para descrever estruturas em que os spins, com uma forte anisotropia que caracteriza um único eixo de orientação z , estão com posições fixas, e ele é calculado através da seguinte expressão [20]:

$$H_I = - \sum_{ij} J_{ij} S_i^z S_j^z - h \sum_i^N S_i^z, \quad (3.1)$$

em que S_i^z é o valor da componente z do spin no sítio i , o qual nesse modelo pode possuir valor $+1$ ou -1 , J_{ij} é o parâmetro de troca entre os spins S_i e S_j (que funciona do mesmo modo que o da subseção 2.1) e por fim h é o campo magnético externo aplicado na direção z . É claro que quando não há campo aplicado, tem-se $h = 0$. Vale ressaltar que o primeiro somatório é entre todos os spins vizinhos i e j , já o segundo somatório é sobre todos os N spins do sistema. Outra observação é que tal modelo é de interesse para descrever sistemas com anisotropia de spin, uma vez que apenas uma única componente de spin é considerada.

O hamiltoniano de Ising foi escrito com o sinal de menos na frente para manter a interpretação de J semelhante a discutida no Capítulo 2, em que $J < 0$ leva a configuração de spins vizinhos anti-alinhados como a de menor energia e $J > 0$ leva o estado ferromagnético como o de menor energia.

Silvio Salinas em seu livro *Introdução à Física Estatística* [20] diz “várias técnicas aproximadas foram desenvolvidas para resolver o modelo de Ising em duas ou três dimensões. Muitas vezes são técnicas úteis, que fornecem bons resultados para os aspectos qualitativos do diagrama de fases e que constituem as poucas ferramentas disponíveis para o estudo analítico de sistemas mais complexos”. Quando se trata do modelo de Ising em duas dimensões, ao utilizar o método de diagonalização exata, o qual será discutido mais a adiante, tem-se uma solução exata para sistemas finitos e uma solução aproximada ao combina-lá com outras técnicas em sistemas infinitos.

3.2 Modelo de Heisenberg

O modelo de Heisenberg é de interesse de estudos de sistemas isotrópicos, sendo seu hamiltoniano na ausência de campo magnético externo:

$$H_H = - \sum_{ij} J_{ij} \vec{S}_i \vec{S}_j, \quad (3.2)$$

em que \vec{S}_i continua sendo o spin localizado no sítio i , entretanto, ele é agora descrito pelos operadores da mecânica quântica [27]:

$$\vec{S} = S^x \vec{e}_x + S^y \vec{e}_y + S^z \vec{e}_z, \quad (3.3)$$

S^x , S^y , S^z , são os operadores de spins e possuem respectivamente os vetores unitários \vec{e}_x , \vec{e}_y e \vec{e}_z . Em particular, o modelo de Ising, discutido na seção 3.1, é uma versão anisotrópica do modelo de Heisenberg, que considera interações de troca apenas ao longo do eixo de fácil magnetização, com os operadores de spin restritos a uma única direção, geralmente \vec{e}_z .

Na mecânica quântica é usual adotar o eixo z para ser o eixo preferencial [15] [27] [25], e como o modelo de Heisenberg é demonstrado a partir da interação entre elétrons [13] [18] o spin pode assumir valores $\pm \frac{1}{2}$.

Os operadores de componente de spin podem ser escritos em termos dos operadores escadas:

$$S^x = \frac{1}{2}(S_+ + S_-), \quad (3.4)$$

$$S^y = \frac{1}{2i}(S_+ - S_-), \quad (3.5)$$

em que os operadores escadas atuam em um estado de spin $|S^z\rangle$ da seguinte forma:

$$S_+|S^z\rangle = \sqrt{S(S+1) - S^z(S^z+1)}|S^z+1\rangle, \quad (3.6)$$

$$S_-|S^z\rangle = \sqrt{S(S+1) - S^z(S^z-1)}|S^z-1\rangle. \quad (3.7)$$

Devido aos operadores escada, a matriz do Hamiltoniano irá apresentar elementos fora da diagonal, os quais podem ser facilmente lidados pelo método de diagonalização exata.

3.2.1 Interação Kondo no Modelo de Heisenberg

Os hamiltonianos até agora apresentados buscam descrever um sistema de spins fixos em suas posições, porém o contexto o qual a interação Kondo está inserida envolve elétrons de condução que podem ou não acoplar há um sítio de spin. O seu hamiltoniano em um sistema isotrópico é dado da seguinte maneira [13] [25]:

$$H_K = - \sum_{ij,\sigma} t_{ij} [c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + c_{j\sigma}^\dagger c_{i\sigma}] - K \sum_i \vec{S}_i \vec{\sigma}_i. \quad (3.8)$$

O primeiro somatório é sobre todas as configurações possíveis de elétrons itinerantes nas proximidades do sítio i que podem saltar para uma região entorno do sítio vizinho j . Isso é feito para cada valor de σ , sendo σ o spin do elétron itinerante, t_{ij} é o parâmetro de salto de um férmion/elétron do sítio i para o sítio j , $c_{i\sigma}^\dagger$ o operador de criação de férmion com spin σ no sítio i e $c_{i\sigma}$ é o operador de aniquilação de férmion para essas mesmas circunstâncias.

Já o segundo somatório é sobre todos o N sítios que possuem um spin localizado \vec{S} com seu respectivo spin itinerante $\vec{\sigma}$, em que K denota a força de acoplamento Kondo entre os spins \vec{S} e $\vec{\sigma}$.

Fisicamente, o primeiro termo do hamiltoniano (3.8) fornece a informação da energia envolvida no processo de salto (hopping) entre regiões próximas, enquanto o segundo termo se trata da energia envolvida no processo de acoplamento Kondo. Matematicamente falando, K pode ser tanto positivo quanto negativo, porém é coerente tratar K somente para valores negativos, pois uma vez que o spin do elétron de condução acoplar com o do localizado, devido ao princípio da exclusão de Pauli, eles devem possuir diferentes orientações de spins.

3.3 Média Térmica e Diagonalização Exata

Na mecânica quântica o valor esperado térmico de um observável físico é dado da seguinte maneira [27]:

$$\langle \hat{A} \rangle = \frac{1}{Z} \text{Tr}\{Ae^{-\beta H}\}, \quad (3.9)$$

$$Z = \text{Tr}\{e^{-\beta H}\}, \quad (3.10)$$

em que \hat{A} é um operador de um observável físico, o traço $\text{Tr}\{A\}$ é a soma de todos os elementos da diagonal da matriz do \hat{A} , Z é a função de partição e $\beta = 1/k_B T$, sendo k_B a constante de Boltzmann.

Para calcular a média de maneira adequada é necessário que H seja diagonal e que \hat{A} esteja na mesma base de H , então caso ele já esteja diagonal pode-se escrever a Equações 3.9 e 3.10 em termos dos autovetores $|n\rangle$ e das autoenergias E_n :

$$\langle \hat{A} \rangle = \frac{1}{Z} \sum_n \langle n | A e^{-\beta H} | n \rangle = \frac{1}{Z} \sum_n e^{-\beta E_n} \langle n | A | n \rangle, \quad (3.11)$$

$$Z = \sum_n e^{-\beta E_n}. \quad (3.12)$$

Mas, se H não for diagonal, é necessário diagonaliza-lo, então ao escrever o traço em termos de D que é a matriz que diagonaliza o hamiltoniano obtem-se:

$$\text{Tr}\{Ae^{-\beta H}\} = \text{Tr}\{DD^{-1}ADD^{-1}e^{-\beta H}\}, \quad (3.13)$$

$$\text{Tr}\{Ae^{-\beta H}\} = \text{Tr}\{D^{-1}ADD^{-1}e^{-\beta H}D\}, \quad (3.14)$$

$$\text{Tr}\{Ae^{-\beta H}\} = \text{Tr}\{D^{-1}ADe^{-\beta E}\}, \quad (3.15)$$

em que $E = D^{-1}HD$, ou seja, a matriz de autovalores de H .

Uma desvantagem desse método é que ele não pode ser aplicado para sistemas muito grandes, pois o número de elementos da matriz seria elevado. Por exemplo, um cluster de 25 sítios de spin e nada mais teria 2^{25} estados possíveis e a matriz do hamiltoniano desse sistema seria de $33.554.432 \times 33.554.432$, assim ocupando no mínimo mais de 9 milhões de Gigabytes de memória RAM para fazer a diagonalização com precisão “real double”, o que evidencia que esse método tem um limite até quando implementado computacionalmente.

Fazer os processos de diagonalização e mudança de base pode ser humanamente inviável dependendo do tamanho da matriz, portanto é interesse montar um algoritmo computacional para fazer tais processos, o qual será debatido Capítulo 4, porém com uma aplicação específica a esse trabalho.

3.4 Teoria de Campo Médio com Clusters

Nas Seções anteriores foram discutidos hamiltonianos que descrevem interações entre momentos magnéticos, além de serem apresentadas ideias para a obtenção de observáveis via diagonalização exata para sistemas finitos. Entretanto, um material real geralmente possui um número de constituintes de no mínimo da ordem de 10^{23} átomos, o que torna inviável uma resolução exata, mesmo computacionalmente. Portanto, como o sistema real é muito grande, é interessante tratar ele como sendo infinito, e fazer a aproximação do sistema estudado através de um sistema de referência resolvível, que é aproximar a rede infinita por um cluster finito isolado que está na presença de campos médios em suas fronteiras. Vale ressaltar que para utilizar desse método é preciso que a rede cristalina seja periódica no espaço com sua repetição sendo a estrutura do cluster, pois a aproximação é feita através de um cluster efetivo cercado por outro idênticos.

Com o objetivo de melhorar visualização do contexto e do sentido dos próximos cálculos apresenta-se a Figura 3.1, a qual possui uma rede quadrada com um cluster quadrado no centro da imagem, assim sendo o cluster um possível sistema de referência e a rede como um todo seu sistema original.

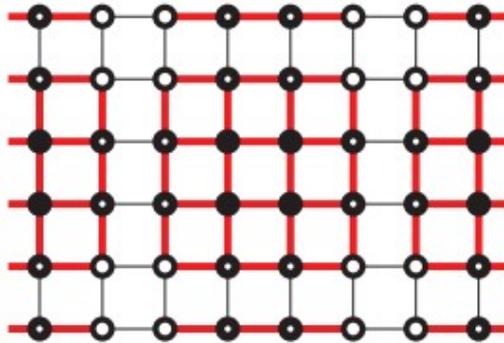


Figura 3.1: Rede Quadrada. Fonte [28].

O desenvolvimento matemático a seguir é baseado na Referência [28], ou seja, para spins descritos pelo modelo de Ising, e para economizar notação $k_B T$ vai ser escrito como somente T e S_i^z será escrito como S_i .

A função de partição de um sistema de referência com energia E^0 é:

$$Z_0 = \sum_{\sigma} e^{-E_{\sigma}^0/T}, \quad (3.16)$$

em que o subíndice σ presente na energia serve para denotar o spin de um certo sítio de spin S_i . A função de partição do sistema original pode ser escrita da seguinte forma:

$$Z = Z_0 \frac{\sum_{\sigma} e^{-E_{\sigma}/T} e^{-(E_{\sigma}^0 - E^0)/T}}{Z_0} = Z_0 \frac{\sum_{\sigma} e^{-E_{\sigma}^0/T} e^{-(E_{\sigma} - E^0)/T}}{Z_0}, \quad (3.17)$$

$$Z = Z_0 \langle e^{-(E - E^0)/T} \rangle_0, \quad (3.18)$$

$\langle e^{-(E - E^0)/T} \rangle_0$ é a média térmica de $e^{-(E - E^0)/T}$ com base no sistema de referência.

Utilizando a desigualdade de Bogoliubov [29], a última expressão pode ser escrita como:

$$Z \geq Z_0 e^{-\langle E - E^0 \rangle_0/T}. \quad (3.19)$$

Sabe-se que a energia livre de Helmholtz é $F = -T \ln(Z)$, então devido à desigualdade anterior:

$$F \leq F^{\ominus} = -T \ln(Z_0 e^{-\langle E - E^0 \rangle_0/T}) = F_0 + \langle E - E^0 \rangle_0, \quad (3.20)$$

em que F^{\ominus} é a energia livre referente ao lado direito da desigualdade da Equação 3.19 e serve como um limite superior para a energia livre F do sistema original. Portanto, para minimizar o parâmetro superior, é preciso derivá-lo e igualá-lo a zero, porém algumas coisas precisam ser esclarecidas antes.

A energia do sistema de referência é dada pela soma das energias dos clusters isolados:

$$E^0 = \sum E_c^0, \quad (3.21)$$

$$E_c^0 = - \sum_{ij} J_{ij} S_i S_j - \sum_{i=1}^n h_i S_i, \quad (3.22)$$

em que h_i é o campo médio que atua em um spin S_i situado na borda do cluster e n é o número de spins na borda do cluster, claro isso considerando apenas interações entre primeiros vizinhos. Já a energia do sistema original é:

$$E = \sum E_c, \quad (3.23)$$

$$E_c = - \sum_{ij} J_{ij} S_i S_j - \frac{1}{2} \sum_{(ij)'} J_{ij} S_i S_j, \quad (3.24)$$

sendo $(ij)'$ usado para definir a soma entre a interação do spin S_i do cluster e o S_j de fora do cluster, a divisão por 2 é para eliminar contribuições energéticas duplicadas, pois para a energia total irá se somar E_c de todos os clusters.

Como os dois sistemas são feitos por clusters idênticos minimizar $\langle E_c - E_c^0 \rangle_0$ significa minimizar também $\langle E - E^0 \rangle_0$, escrevendo explicitamente tem-se:

$$\langle E_c - E_c^0 \rangle = \frac{1}{2} \sum_{(ij)'} J_{ij} \langle S_i \rangle_0 \langle S_j \rangle_0 + \sum_{i=1}^n h_i \langle S_i \rangle_0, \quad (3.25)$$

em que termos intracluster somem e intercluster permanecem. Agora é possível encontrar o campo médio que minimiza F^Θ :

$$\frac{\partial F^\Theta}{\partial h_k} = \beta \sum_i^n [(\sum_{(j)_i} J_{ij} \langle S_j \rangle_0 + h_i)(\langle S_i S_k \rangle_0 - \langle S_i \rangle_0 \langle S_k \rangle_0)] = 0, \quad (3.26)$$

em que o subíndice $(j)_i$ no somatório representa uma soma em j adequado a um dado i . Isolando h_i tem-se que:

$$h_i = h_{eff} = - \sum_{(j)_i} J_{ij} \langle S_j \rangle_0, \quad (3.27)$$

assim mostrando que o campo médio efetivo (h_{eff}) que é o que minimiza F^Θ precisa ser resolvido através da uma autoconsistência. Por fim escrevendo o hamiltoniano do sistema de referência que mais se aproxima do original:

$$H_{eff}^0 = - \sum_{ij} J_{ij} S_i S_j + \sum_{(ij)'} J_{ij} S_i \langle S_j \rangle_0. \quad (3.28)$$

Uma observação importante é que esse último hamiltoniano se refere a energia de um único cluster, como o raciocínio parte de que há repetição de clusters idênticos para formação do sistema, não existe problema algum ao calcular grandezas intensivas com esse hamiltoniano.

Capítulo 4

Abordagens específicas do trabalho

Para estudar, na ausência de campo magnético externo, uma rede triangular com interações anisotrópicas e antiferromagnéticas entre primeiros vizinhos e interação Kondo antiferromagnética, foi adotado um modelo descrito pelo seguinte hamiltoniano:

$$H = -J \sum_{nk} S_n^z S_k^z - t \sum_{nk,\sigma} [c_{n\sigma}^\dagger c_{k\sigma} + c_{k\sigma}^\dagger c_{n\sigma}] - K \sum_n \vec{S}_n \vec{\sigma}_n, \quad (4.1)$$

em que os operadores de spin, os operadores de aniquilação/criação de férmion e os parâmetros J , K e t tem a mesma descrição do que discutido nos últimos dois Capítulos. Porém, como se trata de uma rede, há um grande número de sítios, tal número pode ser tratado como tendendo ao infinito. Os somatórios em n e k somam as possíveis aplicações dos operadores em um sítio n com seu primeiro vizinho k .

Para resolver esse modelo, foi utilizado a técnica de TCMC em que o sistema efetivo é um cluster triangular com três sítios e apenas um único elétron de condução, em que o hopping entre clusters foi desconsiderado em uma primeira abordagem aproximativa. O que leva, com operadores e índices de somatório descritos pelo Capítulo 3, ao seguinte hamiltoniano para esse sistema efetivo:

$$H = H_{in} + H_{en}, \quad (4.2)$$

com

$$H_{in} = -J \sum_{ij} S_i^z S_j^z - t \sum_{ij,\sigma} [c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + c_{j\sigma}^\dagger c_{i\sigma}] - K \sum_i \vec{S}_i \vec{\sigma}_i \quad (4.3)$$

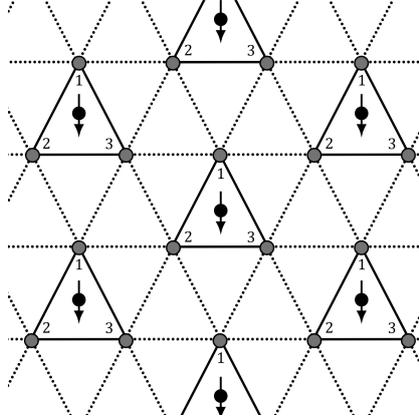


Figura 4.1: Rede Triangular

e

$$H_{en} = - \sum_{(ij)'} J_{ij} S_i^z \langle S_j^z \rangle_0. \quad (4.4)$$

Esse sistema efetivo possui um hamiltoniano (Equação 4.2) composto pela soma de outros dois, um para as interações intra cluster (Equação 4.3) e outro para as interações entre clusters via TCMC (Equação 4.4), em que o primeiro termo será destrinchado nas Seções 4.1 e 4.3 e o segundo termo na Seção 4.5:

Com a finalidade de estudar o cluster, os contextos abordados nas Seções 3.1 e 3.3 e Subseção 3.2.1 serão especificados nas seções seguintes para o caso do cluster triangular com um único elétron de condução, o qual é usado para resolver o sistema original. A Figura 4.1 trás uma ilustração do sistema efetivo.

A resolução tanto analítica quanto computacional será feita nas Seções seguintes desse mesmo Capítulo.

4.1 Interação Kondo em Cluster Triangular anisotrópico

Um detalhe importante sobre esse sistema é que apesar da interação entre spins localizados ser descrita pela modelo de Ising devido a sua anisotropia, a interação Kondo ocorre nas três componentes de spin, conforme a Equação 4.3. O primeiro termo desse hamiltoniano trata das interações de troca entre spins localizados do cluster, portanto, seguindo a numeração da Figura 4.1, tem-se para todos os estados da base que:

$$H_{intra} = -J[S_1^z S_2^z + S_1^z S_3^z + S_2^z S_3^z] - t \sum_{ij,\sigma} [c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + c_{j\sigma}^\dagger c_{i\sigma}] - K \sum_i^N \vec{S}_i \vec{\sigma}_i, \quad (4.5)$$

porém, os operadores dos últimos dois somatórios devem ser utilizados com cuidado, pois em cada um dos estados da base só há um sítio i que possui um elétron de condução associado a ele. Essa parte será feita juntamente com a parte computacional na Secção 4.3.

4.2 Representação Computacional dos Estados da Base

O cluster com apenas três sítios de spins teria 8 estados da base (2^3). Um cluster com três sítios e apenas um elétron de condução teria 6 estados da base, 2 estados para cada sítio do cluster, pois o spin pode estar para cima ou para baixo. Quando o cluster possui três sítios de spins localizadas e um elétron de condução, deve-se considerar, portanto, o número de estados da base do sistema igual a $2^3 \times 6$, que é igual a 48. Para representar os estados da base foram utilizados as representações binárias dos números, em que um ou dois bits binários desses números representam o estado de um elétron no sistema, um bit para o estado do elétron localizado e dois para representar o estado do elétron itinerante. Por exemplo, o número 17 é representado na base binária da seguinte maneira:

$$17 = 00 \ 00 \ 10 \ 001. \quad (4.6)$$

Os três primeiros binários (da direita pra esquerda) representam os spins localizados, sendo 0 usado para representar o spin para baixo e 1 o spin para cima. Já os 3 pares seguintes de binários são usados para representar o elétron de condução, sendo os pares da direita para esquerda os sítios 1,2 e 3 respectivamente, em que 00 representa sítio não ocupado por elétron de condução, 01 representa que há um elétron itinerante de spin para baixo naquele sítio e 10 o de spin para cima.

Então para representar todos os estados da base no código em fortran, foram armazenados em uma matriz os números de 8 até 15, 16 até 23, 32 até 39, 64 até 71, 128 até 135 e 256 até 263. Uma observação para esses grupos de números é que são seis grupos, três para posições possíveis do elétron itinerante e mais três para cada posição, porém de spin contrário. Outro detalhe é que cada conjunto de números possui oito elementos, o que se refere as combinações possíveis dos spins dos elétrons localizados.

4.3 Abordagem Numérica para interações dentro do Cluster

As energias das interações dentro do cluster são obtidas através do hamiltoniano da Equação 4.3, em que a abordagem numérica computacional de cada um dos três termos será discutida nas Subseções seguintes de maneira respectiva.

4.3.1 Interação de troca

O primeiro termo desse hamiltoniano (chamando-o de H_J) representa as interações de troca entre os spins localizados, que dependem do parâmetro de troca J e dos operadores de spin. Para exemplificar como atuam os operadores de spin nos elementos de estado na representação binária, toma-se o número 9, que representa o estado $|9\rangle$, descrito pela seguinte sequência de bits:

$$9 = 00\ 00\ 01\ 001, \quad (4.7)$$

ou seja,

$$|9\rangle = |00\ 00\ 01\ 001\rangle, \quad (4.8)$$

então $|9\rangle$ possui $S_1^z = +1/2$, $S_2^z = -1/2$ e $S_3^z = -1/2$.

Quando $\hat{H}_J|9\rangle$, tem-se o seguinte resultado:

$$\hat{H}_J|9\rangle = -JS_1^z S_2^z |9\rangle - JS_1^z S_3^z |9\rangle - JS_2^z S_3^z |9\rangle, \quad (4.9)$$

$$\hat{H}_J|9\rangle = \frac{J}{4}|9\rangle + \frac{J}{4}|9\rangle - \frac{J}{4}|9\rangle, \quad (4.10)$$

$$\hat{H}_J|9\rangle = \frac{J}{4}|9\rangle. \quad (4.11)$$

Para esse trabalho foi escolhida a base Ising, portanto a aplicação do \hat{H}_J , o qual só possui operadores Ising, em qualquer estado da base gera somente termos na diagonal (autovalores) da matriz do hamiltoniano.

Para fazer esse cálculo computacionalmente (em linguagem FORTRAN) é relativamente simples, só foi preciso usar o comando BTEST nos três primeiros bits dos números escolhidos como elementos da base. Por exemplo, $BTEST(j, i)$, onde j é um número inteiro que representa o elemento da base e i corresponde a posição do bit na representação binária de j , pode retornar duas possibilidades: “true” se o bit na posição i é 1 ou “false” se o bit na posição i tiver valor 0. Se $BTEST = \text{“true”}$, atribui-se spin para cima ($+1/2$)

em um vetor no código, caso contrário, spin para baixo ($-1/2$). Uma vez tais informações armazenadas é só fazer a multiplicação dos valores de maneira adequada.

4.3.2 Termo de salto

O segundo termo do hamiltoniano (chamando-o de H_t) envolve os operadores de criação e aniquilação de férmion, o que ocasionará em elementos fora da diagonal, exemplificando para o mesmo estado da base da Subseção anterior:

$$|9\rangle = |00\ 00\ 01\ 001\rangle, \quad (4.12)$$

$$\hat{H}_t|9\rangle = -t[c_{2\sigma}^\dagger c_{1\sigma} + c_{1\sigma}^\dagger c_{2\sigma}]|9\rangle - t[c_{3\sigma}^\dagger c_{1\sigma} + c_{1\sigma}^\dagger c_{3\sigma}]|9\rangle, \quad (4.13)$$

$$\hat{H}_t|9\rangle = -t|00\ 01\ 00\ 001\rangle - t|01\ 00\ 00\ 001\rangle, \quad (4.14)$$

$$\hat{H}_t|9\rangle = -t|33\rangle - t|129\rangle, \quad (4.15)$$

portanto, encontra-se: $\langle 9|\hat{H}_t|33\rangle = -t$ e $\langle 9|\hat{H}_t|129\rangle = -t$.

Para fazer isso computacionalmente foi necessário utilizar nas posições adequadas (nos setores de representação binária que representam os elétrons de condução) os comandos IBSET e IBCLR, que respectivamente transformam um bit 0 em 1 e um bit 1 em 0. Com isso, a representação binária do número 9, para satisfazer as regras dos operadores em H_t , teve alguns de seus bits “trocados” de posição, gerando novas sequências de bits (elementos da base) que podem ser representados pelos números decimais 33 e 129.

Assim obtendo o valor $-t$ na linha do estado em que o operador foi utilizado (nesse caso o $\hat{H}_t|9\rangle$) e a coluna dos estados que aparecem a direita da igualdade.

4.3.3 Interação Kondo

E por fim, o terceiro termo do hamiltoniano (chamando-o de H_K), o qual tem operadores de spins que são descritos nas três direções, assim os operadores das componentes x e y podem ser escritos em termos dos operadores escada (Equações 3.4 e 3.5) da seguinte maneira:

$$\vec{S}_i \vec{\sigma}_i |9\rangle = S_i^z \sigma_i^z |9\rangle + \frac{1}{2}(S_i^+ \sigma_i^- + S_i^- \sigma_i^+) |9\rangle. \quad (4.16)$$

Então, exemplificando como fica o resultado da aplicação desses operadores:

$$\hat{H}_K|00\ 00\ 01\ 001\rangle = -K\vec{S}_1\vec{\sigma}_1|00\ 00\ 01\ 001\rangle = -K\vec{S}_1|1\rangle\vec{\sigma}_1|01\rangle, \quad (4.17)$$

como não há elétron de condução nos sítios 2 e 3, o operador $\vec{\sigma}$ retornará zero nesses sítios, por isso a passagem da primeira igualdade foi feita. Continuando a resolução:

$$K\vec{S}_1|1\rangle\vec{\sigma}_1|01\rangle = -\frac{K}{4}|00\ 00\ 01\ 001\rangle + \frac{K}{2}|00\ 00\ 10\ 000\rangle, \quad (4.18)$$

logo

$$\hat{H}_K|9\rangle = \frac{K}{4}|9\rangle - \frac{K}{2}|16\rangle. \quad (4.19)$$

Esses valores são armazenados na matriz do hamiltoniano utilizando a mesma lógica da Subseção anterior, porém obviamente mudando o valor numérico a ser atribuído para aquela cédula da matriz.

4.4 Cálculo da Magnetização

O valor esperado da magnetização de cada um dos sítios é obtido pelo valor médio da componente z spin de cada um dos sítios. Para fazer isso, é lido o valor de cada um dos bits dos estados das base e armazenado em três matrizes (M_1^z , M_2^z e M_3^z) uma para cada sítio. Agora para calcular o valor médio dessas quantidades é preciso fazer uma diagonalização exata, pois isso será feito no computador. O motivo é que a matriz do hamiltoniano precisa ser diagonalizada para que o valor médio da magnetização seja calculado adequadamente, e ao diagonalizá-la é preciso colocar as matrizes das magnetizações na mesma base do hamiltoniano. Computacionalmente a diagonalização foi feita utilizando a subrotina DSYEV da biblioteca LAPACK, a qual calcula a matriz que a diagonaliza o hamiltoniano (e a sua inversa) e seus autovalores da nova base diagonalizada. Uma vez que isso foi calculado, faz-se uma diagonalização das matrizes dos spins e então usa-se a Equação 3.9.

4.5 Abordagem Numérica para TCMC Triangular

O hamiltoniano da Equação 4.4 é responsável pelas interações entre os clusters, em que ele possui um valor médio dentro do somatório. De acordo

com a Figura 4.1, cada spin do cluster efetivo (no centro) tem 4 spins vizinhos externos a ele, então ao denotar a magnetização de um sítio i como $m_i = \langle S_i^z \rangle_0$, pode se escrever o seguinte:

$$H_{en} = -2J[m_1(S_2^z + S_3^z) + m_2(S_3^z + S_1^z) + m_3(S_1^z + S_2^z)]. \quad (4.20)$$

Para calcular m_i é necessário descobrir H da Equação 4.2 que por sua vez depende de m_i , então para tal, foi utilizado um método iterativo para resolução desse problema. Primeiro calcula-se o hamiltoniano intracluster e o salva, após isso, atribui-se valores iniciais para os m de cada sítio, então calcula-se o hamiltoniano das interações entre clusters, obtém-se a matriz que diagonaliza o hamiltoniano total, faz a mudança de base de M_1 , calcula-se m_1 , substitui no hamiltoniano entre cluster, repete esse processo para m_2 e m_3 , e então verifica-se se o valor inicial e o calculado estão dentro da tolerância (5×10^{-8}) através da comparação de valor absoluto entre o valor inicial e calculado, caso não, os valores iniciais se tornam uma mistura da solução calculada e da inicial (Equação 4.21) e repete-se o processo até convergir. Este último processo descrito está ilustrado no fluxograma da Figura 4.2.

A mistura de soluções serve para fazer uma solução de método iterativo convergir, no caso desse trabalho para resolver o problema das magnetizações dos sítios contornarem o valor zero ao chegarem próximos da temperatura crítica. Essa mistura entre o valor do próximo passo A do método e o resultado do passo anterior B é intermediada pelo coeficiente de mistura α e dada pela seguinte Equação:

$$A = A(1 - \alpha) + B\alpha, \quad (4.21)$$

no caso foi usado $\alpha = 0.5$.

Vale comentar que o parâmetro de “hopping” (com valor numérico $t = 1$) foi utilizado para normalizar os parâmetros T , J e K , os quais são utilizados para formar as seguinte definições: T/t , $J_{AF} = -J/t$ e $K_{AF} = -K/t$. O subíndice AF somado a essa definição com sinal negativo na frente dos parâmetros é para facilitar a compreensão das discussões dos dois capítulos a seguir, pois sempre será falado sobre interações AF entre quaisquer spins.

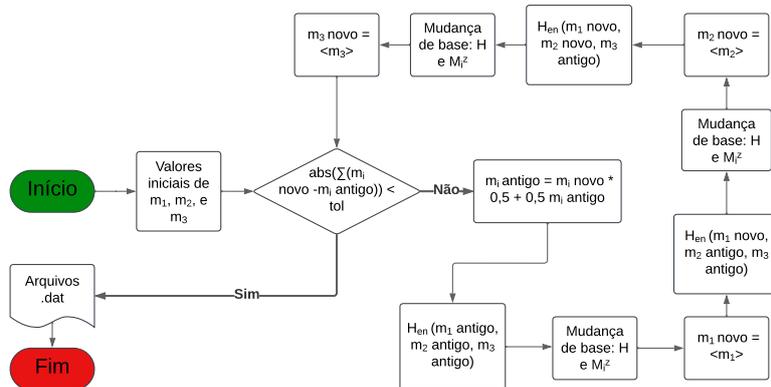


Figura 4.2: Fluxograma de programação do algoritmo para calculo do hamiltoniano entre clusters.

Capítulo 5

Resultados e Discussões

Os resultados a seguir são obtidos conforme os cálculos e algoritmos apresentados no Capítulo 4, ou seja, através do valor médio via diagonalização exata e solução numérica por método iterativo para as equações autoconsistentes.

Na Figura 5.1 tem-se a magnetização de cada sítio, conforme a Figura 4.1, em função da temperatura com $J_{AF} = 1.00$ e $K_{AF} = 0.00$. Nesse gráfico, em temperaturas próximas a zero há um sítio com componente $S^z = +0.5$, outro com -0.5 e um último com 0.0 , sendo que os dois primeiros vão diminuindo de valor em módulo até se tornarem nulos na $T/t = 0.625$. Em particular, $T/t = 0.625$ representa a temperatura crítica de transição da fase AF frustrada para PM.

Como a interação é a AF, os três spins alcançam a configuração de sua energia mínima quando todos eles estão anti-alinhados em pares, mas como é um sistema que possui frustração geométrica essa condição não pode ser alcançada em todos os pares de spins vizinhos. Portanto para temperaturas próximas de zero pode-se dizer que o cluster está em uma fase AF frustrada, pois dois spins ficam anti-alinhados entre si ($m_1 = -m_2 \neq 0$), porém o terceiro possui $m_3 = 0$ devido ao fato que se ele se anti-alinha com um ele obrigatoriamente irá se alinhar com o outro, então como tanto faz se ele fica no sentido positivo ou negativo seu valor esperado se torna nulo.

Agora um questionamento importante: se o sistema possui interações AF, por que conforme a temperatura aumenta ele perde esse caráter? O que há aqui é uma competição entre as interações de spins com as flutuações térmicas. Observe novamente a Equação 3.9:

$$\langle \hat{A} \rangle = \frac{1}{Z} \sum_n e^{-\frac{E_n}{k_B T}} \langle n | A | n \rangle, \quad (5.1)$$

nela existem dois regimes, $E_n \gg k_B T$ e $E_n \ll k_B T$.

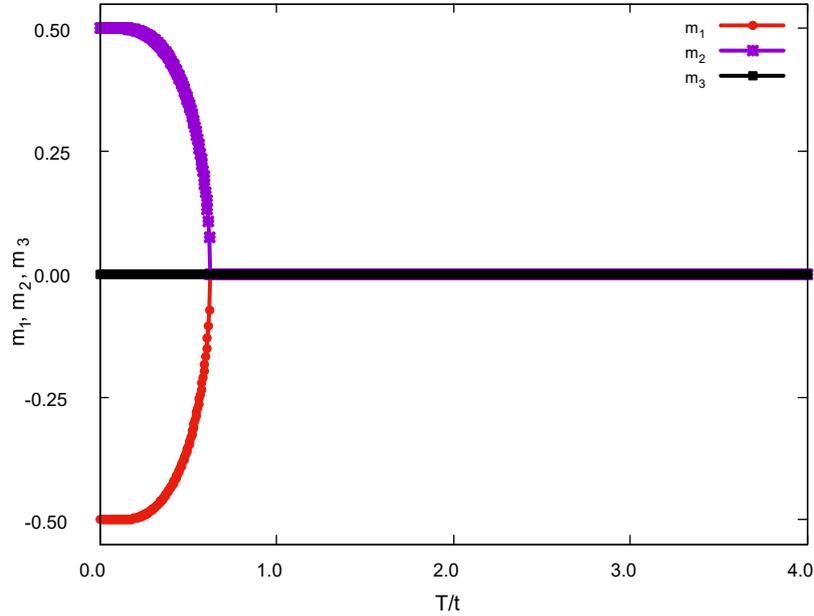


Figura 5.1: Magnetização de cada sítio em função da temperatura normalizada, para $J_{AF} = 1.00$ e $K_{AF} = 0$.

No primeiro caso, a temperatura é muito menor que o módulo de qualquer energia, em especial aos dos estados AF, que são os fundamentais. Em um caso de limites, seria dito que o argumento da exponencial tende a ∞ (o que é verdade), porém nesse caso T é pequeno mas não é nulo, assim resultado em contribuições maiores dos estados AF no cálculo do valor médio, entretanto, essas contribuições são finitas. Isso significa que os estados de menores energias (que são negativas) vão possuir um peso maior nessa espécie de média ponderada que é o valor esperado. Então, nesse cenário, pode-se dizer que os estados de menor energia são mais bem decisivos para o resultado do valor esperado do que as flutuações térmicas, ou seja, em termos de competição, as interações AF vencem, levando o sistema ao estado AF frustrado.

No segundo caso, T é muito grande em relação a qualquer energia, o que vai levar a exponencial tender a 1, assim todos os estados tem a mesma probabilidade de ocorrência, inclusive os que tem todos os spins alinhados, portanto resultando em um valor esperado nulo de m para todos os sítios de spins, logo a flutuação térmica é a responsável por esse resultado.

Agora sobre a região de transição entre esses dois regimes, é possível observar que conforme a temperatura aumenta m_1 e m_2 vão diminuindo em módulo, ou seja, cada vez mais a temperatura vai dominando o sistema em relação as energias, assim mostrando uma transição progressiva entre os dois

casos limites.

Se ler o gráfico da direita para a esquerda, tem-se que todos os sítios têm $m = 0$ e a partir de uma temperatura crítica, no caso $T/t = 0.625$, dois desses sítios apresentam esse parâmetro como não nulo, com um aumento contínuo, o que pode ser interpretado como sendo uma transição de fase de segunda ordem entre as fase PM e AF.

Na Figura 5.2 tem-se a magnetização de cada sítio em função da temperatura na ausência de interação Kondo ($K_{AF} = 0$) para diferentes intensidades de interações de troca AF. Nela há quatro gráficos, os quais, em ordem alfabética, trazem resultados de $J_{AF} = 0.25$, $J_{AF} = 1.00$, $J_{AF} = 2.00$ e $J_{AF} = 4.00$, com temperaturas críticas respectivamente de 0.160, 0.625, 1.240 e 2.500.

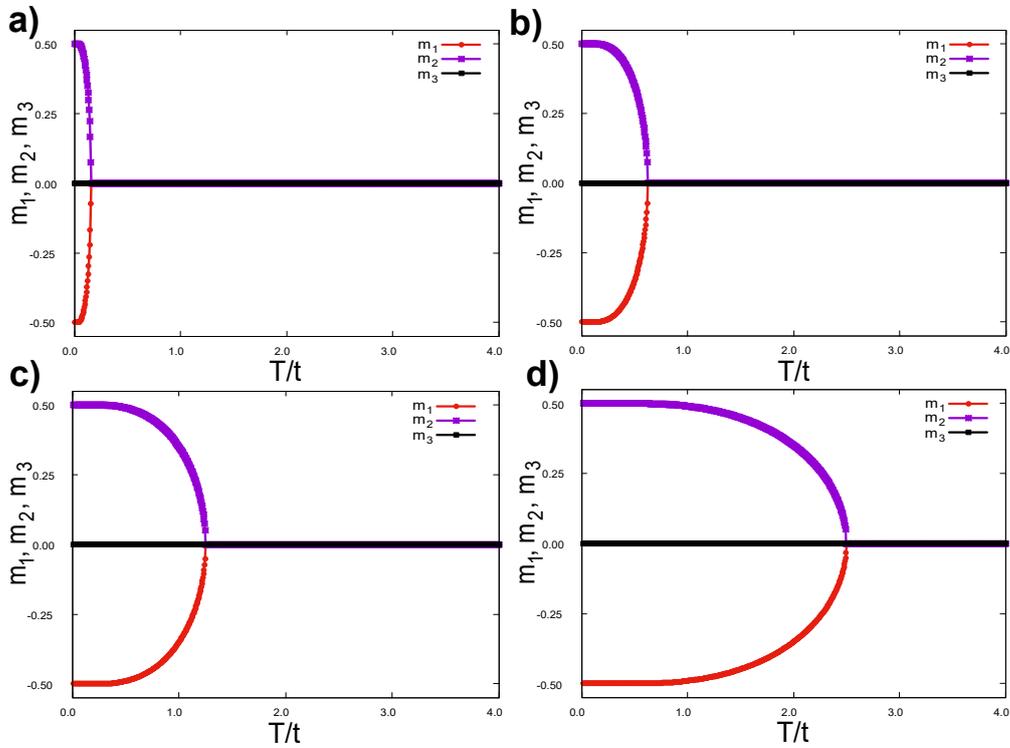


Figura 5.2: Magnetização dos sítios em função de T/t na ausência de interação Kondo para a) $J_{AF} = 0.25$ b) $J_{AF} = 1.00$ c) $J_{AF} = 2.00$ d) $J_{AF} = 4.00$

É notável que conforme aumenta-se o valor de J_{AF} a temperatura de transição também aumenta. Uma interação AF mais intensa proporciona estados de spins anti-alinhados com uma menor energia em relação ao de interação AF menos intensa. O que em termos de interações competitivas significa que as interações antiferromagnéticas conseguem agora definir o comportamento magnético dos sítios de spin a temperaturas mais altas, assim

conseguindo cada vez mais espaço nessa disputa entre interações magnéticas e flutuações térmicas.

Na Figura 5.3 é mostrado quatro gráficos com $J_{AF} = 1.00$ mas com diferentes K_{AF} , em que se tem m_1 , m_2 e m_3 em função de T/t novamente. Nesses gráficos é possível notar que na presença da interação Kondo, o comportamento geral das magnetizações em função da temperatura não mudam, porém há uma diferença na temperatura de transição. Para identificar melhor visualmente essa diferença, a Figura 5.4 mostra esses gráficos ampliados em torno do ponto de transição de fase.

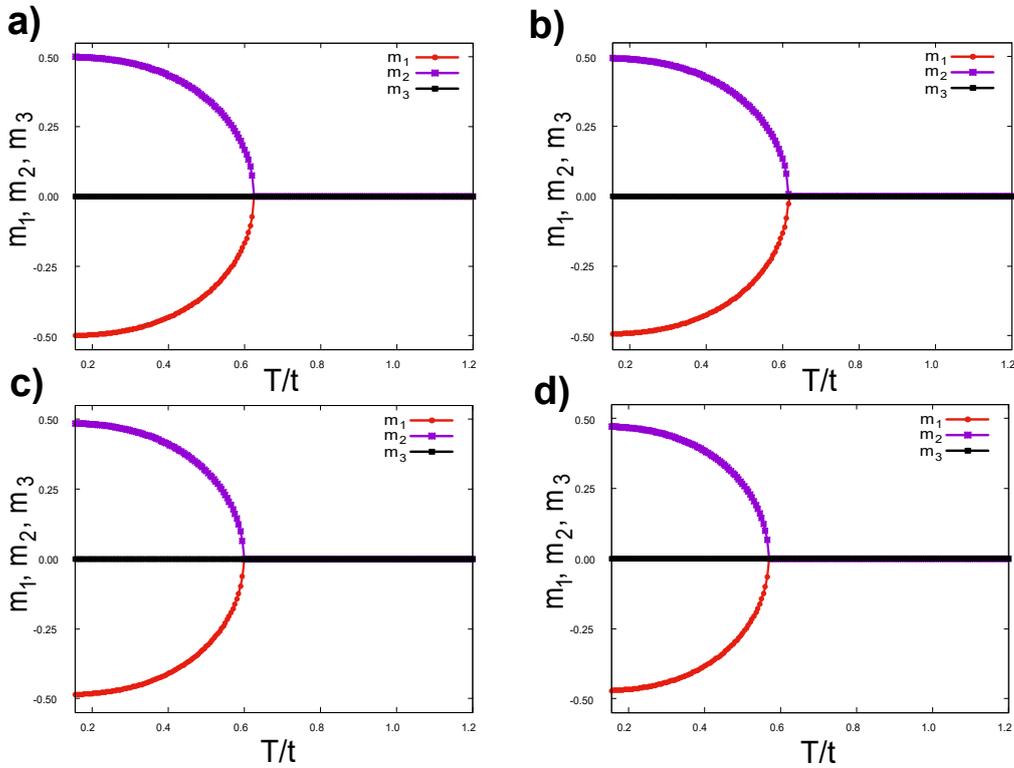


Figura 5.3: Magnetização dos sítios em função de T/t com $J_{AF} = 1.00$ para a) $K_{AF} = 0.00$ b) $K_{AF} = 1.00$ c) $K_{AF} = 2.00$ d) $K_{AF} = 4.00$

As temperaturas em que ocorrem as transições da fase paramagnética para a antiferromagnética frustrada para os valores $K_{AF} = 0.00$, $K_{AF} = 1.00$, $K_{AF} = 2.00$ e $K_{AF} = 4.00$ são respectivamente: 0.625, 0.620, 0.600 e 0.570. Tal padrão indica que um aumento na contribuição energética da interação Kondo diminui a temperatura de transição nessa faixa de parâmetros.

O hamiltoniano desse sistema de referência possui dois termos que incluem o elétron de condução: o termo de hopping e o de interação Kondo.

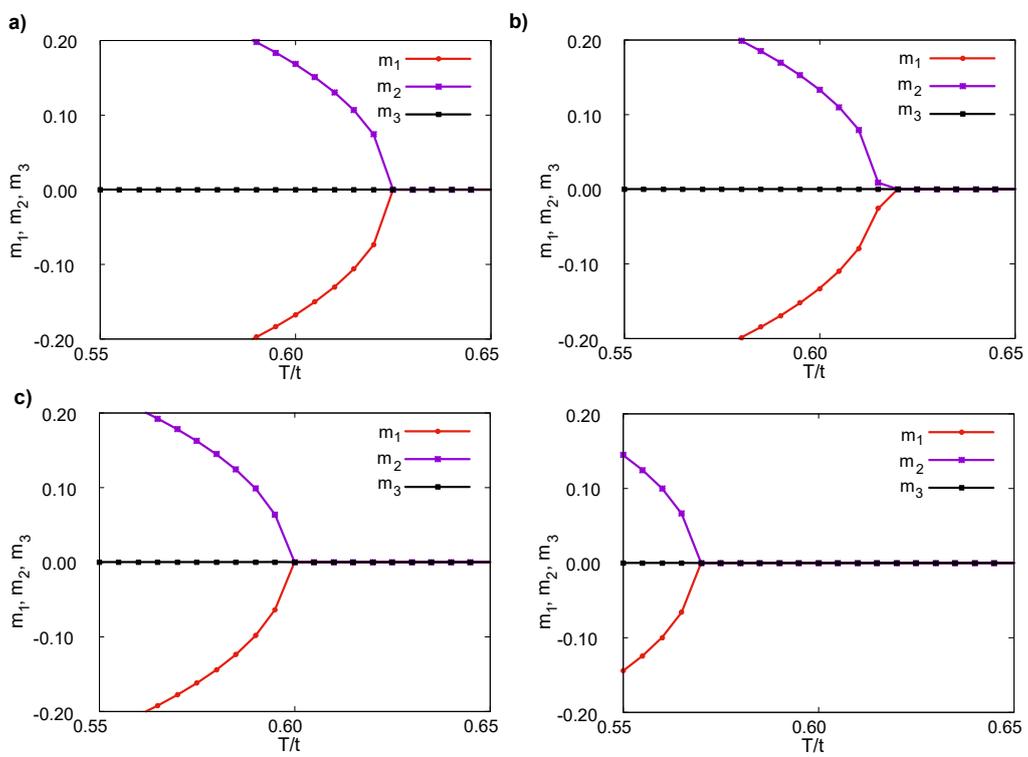


Figura 5.4: Gráficos da Figura 5.3 ampliados no ponto de transição de fase.

No de hopping tem-se que o elétron itinerante pode saltar entre os sítios, e isso combinado com a interação Kondo pode levar a hipótese de que o spin de condução pode favorecer estados em que todos os spins localizados estão alinhados entre si (mas anti-alinhados com o de condução). Porém tal raciocínio é difícil de se provar de maneira mais rigorosa, pois como se trata de uma matriz do hamiltoniano que não é diagonal, ou seja, possui sobreposição de estados quânticos na base Ising, juntamente com o fato de ser uma matriz de 48 linhas e 48 colunas torna complicado o acompanhamento da energia de cada estado individualmente. Entretanto, apesar dessa dificuldade, uma coisa é fato, a presença de interação Kondo favorece estados que não são os que levam a fase AF frustrada no cluster, pois assim na competição entre H e $k_B T$ a temperatura consegue levar a melhor em valores mais baixos.

Também é interessante notar que mesmo os termos de interação de troca e interação Kondo no hamiltoniano do sistema tenham estruturas semelhantes, uma mesma variação numérica em J_{AF} e K_{AF} gerou maiores diferenças nas temperaturas críticas para J_{AF} . Há duas observações interessantes quanto a isso. A primeira é que o termo de interação de troca entre spins localizados é pertencente ao modelo de Ising, enquanto o termo de Kondo considera interações entre as três componentes do spin (semelhante ao modelo de Heisenberg), e isso pode significar que enquanto no Ising toda a energia relacionada ao parâmetro J_{AF} é descrita na direção z e mais nenhuma outra, na interação Kondo essas interações são descritas nas três direções. A segunda é que mesmo considerando que o termo de Hopping de certa forma permita que o elétron itinerante interaja com os três momentos localizados através da sua movimentação no cluster (claro que somada ao termo de Kondo), os spins dos localizados estão interagindo com outros 6 spins, 2 do cluster e 4 dos clusters vizinhos, o que dá um maior número de contribuições para a energia.

Capítulo 6

Conclusões

Ao estudar uma rede antiferromagnética frustrada através da Teoria de Campo Médio com Clusters por meio da aproximação por um cluster triangular de três sítios com um único elétron de condução, foi possível avaliar a competição entre interações AF, flutuações térmicas e interação Kondo.

Nesse caso, essa competição se trata basicamente de disputa entre os termos H e $k_B T$ do fator de Boltzmann presente no cálculo de valor esperado. Uma geometria que leva a frustração na presença de interações AF proporciona valores de m não nulos em dois sítios, os quais possuem sinais opostos (anti-alinhados), porém em um terceiro sítio o apresenta como nulo, o que indica frustração nesse sistema quando H domina sobre T . Porém, ao aumentar a temperatura até que ela domine sobre a energia no fator de Boltzmann, há uma transição de fase (de segunda ordem) do AF frustrado para a fase paramagnética devido aos efeitos das flutuações térmicas.

A temperatura de transição entre essas duas fases magnéticas aumenta com o aumento da intensidade de J_{AF} . Isso é devido a um aumento no módulo de H , o qual é negativo, que pode definir o estado do sistema a temperaturas maiores. Além disso, quando o cluster efetivo possui um elétron de condução que pode interagir via interação Kondo com os spins dos elétrons localizados, há uma diminuição na temperatura crítica. O motivo disso é dado novamente pela disputa entre os termos H e $k_B T$, em que a interação Kondo é responsável por favorecer estados cuja a configuração não leva ao AF. Existe uma suspeita que esses estados favorecidos pelo parâmetro K_{AF} são por obviedade os estados ferromagnéticos, pois são os que restam ao pensar na base Ising. Entretanto, isso necessita de maiores esclarecimentos, pois é preciso saber quais são os novos estados da base no hamiltoniano diagonalizado, e mais ainda, se os autoestados não são sobreposições de dois ou mais estados quânticos, e se não são misturas de estados AF, FM ou ambos.

Tendo tudo isso em vista, foi possível realizar o objetivo de observar o comportamento da temperatura de transição do estado AF frustrado para PM com relação a interação Kondo na presença de interações frustradas entre spins dos elétrons localizados.

Esses resultados dão margem para futuras investigações interessantes. Uma delas seria observar o comportamento do quadrado magnetização total do cluster em relação a esses parâmetros, pois ela poderia dar informações de como os spins estão alinhados entre si, juntamente com as correlações entre spins de localizado-localizado e itinerante-localizado. Outro estudo interessante seria implementar interações do Modelo Heisenberg entre spins dos elétrons localizados e comparar os resultados entre os dois modelos (Ising e Heisenberg). É mais um último exemplo, observar no contexto dessa transição de fase se há blindagem (na direção z) da magnetização de algum sítio de spin, através do cálculo do valor médio da soma: $S_i^z + \sigma_i^z$.

Referências Bibliográficas

- [1] POWELL, B. J.; MCKENZIE, R. H. Quantum frustration in organic mott insulators: from spin liquids to unconventional superconductors. Reports on Progress in Physics, v. 74, n. 5, p. 056501, apr 2011. Disponível em: <<https://dx.doi.org/10.1088/0034-4885/74/5/056501>>.
- [2] THE Nobel Prize in Physics 2024. 2024. 19/12/24.
- [3] KIKUCHI, H. et al. Experimental observation of the 1/3 magnetization plateau in the diamond-chain compound $\text{Cu}_3(\text{CO}_3)_2(\text{OH})_2$. Phys. Rev. Lett., American Physical Society, v. 94, p. 227201, Jun 2005. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.94.227201>>.
- [4] TISHIN, A.; SPICHKIN, Y. Recent progress in magnetocaloric effect: Mechanisms and potential applications. International Journal of Refrigeration, v. 37, p. 223–229, 2014. ISSN 0140-7007. New Developments in Magnetic Refrigeration. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0140700713002466>>.
- [5] ZIMMER, F. M. et al. Enhancement of the magnetocaloric effect in geometrically frustrated cluster spin glass systems. Journal of Physics: Condensed Matter, IOP Publishing, v. 35, n. 31, p. 315801, maio 2023. Disponível em: <<https://dx.doi.org/10.1088/1361-648X/acd040>>.
- [6] YE, F. et al. Spontaneous spin-lattice coupling in the geometrically frustrated triangular lattice antiferromagnet CuFeO_2 . Phys. Rev. B, American Physical Society, v. 73, p. 220404, Jun 2006. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.73.220404>>.
- [7] DRESCHER, K. et al. 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. ISSN 0304-8853. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0304885397011384>>.

- [8] BALENTS, L. Spin liquids in frustrated magnets. Nature, v. 464, p. 199–208, 03 2010.
- [9] KUO, P.-C. et al. Kondo qed: The kondo effect and photon trapping in a two-impurity anderson model ultrastrongly coupled to light. Physical Review Research, American Physical Society (APS), v. 5, n. 4, nov. 2023. ISSN 2643-1564. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevResearch.5.043177>>.
- [10] INOSHITA, T. Kondo effect in quantum dots. Science, v. 281, n. 5376, p. 526–527, 1998. Disponível em: <<https://www.science.org/doi/abs/10.1126/science.281.5376.526>>.
- [11] MAGALHAES, S.; ZIMMER, F.; COQBLIN, B. Spin-glass freezing in kondo-lattice compounds in the presence of a random and a transverse magnetic field. Journal of Magnetism and Magnetic Materials, v. 339, p. 30–35, 2013. ISSN 0304-8853. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S030488531300142X>>.
- [12] CHERN, G.-W. Novel magnetic orders and ice phases in frustrated kondo-lattice models. SPIN, v. 05, n. 02, p. 1540006, 2015. Disponível em: <<https://doi.org/10.1142/S2010324715400068>>.
- [13] COEY, J. M. D. Magnetism and Magnetic Materials. [S.l.]: Cambridge University Press, 2010.
- [14] NISHIMORI, G. O. H. Elements of Phase Transitions and Critical Phenomena. [S.l.]: Oxford University Press, 2011.
- [15] GRIFFITHS, D. J. Quantum Mechanis. [S.l.]: Pearson University, 2011.
- [16] OLIVEIRA, I. S.; JESUS, V. L. B. de. Introdução a Física do Estado Sólido. [S.l.]: Livraria da Física Editorial, 2005.
- [17] PATHRIA, R.; BEALE, P. Statistical mechanics. 3ed. ed. [S.l.]: Elsevier, 2011. ISBN 0123821886,9780123821881.
- [18] CASQUILHO, J. P.; TEIXEIRA, P. I. C. Introdução à Física Estatística. [S.l.]: LF Editotiral, 2012.
- [19] CULLITY, B.; GRAHAM, C. Introduction to Magnetic Materials. [S.l.]: Wiley-IEEE Press, 2008.
- [20] SALINAS, S. R. A. Introdução à Física Estatística. [S.l.]: EDUSP, 2013.

- [21] CHIOAR, I. A.; ROUGEMAILLE, N.; CANALS, B. Ground-state candidate for the classical dipolar kagome ising antiferromagnet. Phys. Rev. B, American Physical Society, v. 93, p. 214410, Jun 2016. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.93.214410>>.
- [22] GREITEMANN, J. et al. Identification of emergent constraints and hidden order in frustrated magnets using tensorial kernel methods of machine learning. Phys. Rev. B, American Physical Society, v. 100, p. 174408, Nov 2019. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.100.174408>>.
- [23] MAHARAJ, D. D. et al. Spin gaps in the ordered states of $\text{La}_2\text{Li}_x\text{O}_6$ ($x=\text{Ru,Os}$) and their relation to the distortion of the cubic double perovskite structure in 4d3 and 5d3 magnets. Physical Review B, 2018. Disponível em: <<https://api.semanticscholar.org/CorpusID:58899300>>.
- [24] KOUWENHOVEN, L.; GLAZMAN, L. Revival of the kondo effect. Physics World, v. 14, n. 1, p. 33, jan 2001. Disponível em: <<https://dx.doi.org/10.1088/2058-7058/14/1/28>>.
- [25] RAY, R.; KUMAR, S. Switchable multiple spin states in the kondo description of doped molecular magnets. Scientific Reports, 2017.
- [26] TAKEGAMI, D. et al. $\text{CaCu}_3\text{Ru}_4\text{O}_{12}$: A high-kondo-temperature transition-metal oxide. Phys. Rev. X, American Physical Society, v. 12, p. 011017, Jan 2022. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevX.12.011017>>.
- [27] SANDVIK, A. W.; AVELLA, A.; MANCINI, F. Computational studies of quantum spin systems. In: AIP Conference Proceedings. AIP, 2010. ISSN 0094-243X. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1063/1.3518900>>.
- [28] JIN, S. et al. Phase transitions in the frustrated ising model on the square lattice. PHYSICAL REVIEW, 2013.
- [29] RUELLE, D. Statistical Mechanics. [S.l.]: World Scientific, 1999.