

UNIVERSIDADE DO ESTADO DE SANTA CATARINA
CENTRO DE CIÊNCIAS TECNOLÓGICAS
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA

DIOVANA DE MELLO LALIS

**Descrição Teórica do Diagrama de Fases dos
Compostos de Férmions Pesados
a partir do Modelo de Anderson Periódico**

Joinville
2015

DIOVANA DE MELLO LALIS

**DESCRIÇÃO TEÓRICA DO DIAGRAMA DE FASES DOS COMPOSTOS
DE FÉRMIONS PESADOS A PARTIR DO MODELO DE ANDERSON
PERIÓDICO**

DISSERTAÇÃO APRESENTADA
PARA A OBTENÇÃO DO TÍTULO
DE MESTRE EM FÍSICA DA UNI-
VERSIDADE DO ESTADO DE SANTA
CATARINA (UDESC), CENTRO DE
CIÊNCIAS TECNOLÓGICAS - CCT.

Orientador:
Prof. Dr. Ben Hur Bernhard

Joinville
2015

L195d

Lalis, Diovana de Mello

Descrição teórica do diagrama de fases dos compostos de férmons pesados a partir do modelo de Anderson periódico / Diovana de Mello Lalis . – 2015.

66 p. : il.; 21 cm

Orientador: Ben Hur Bernhard

Bibliografia: 62-63 p.

Dissertação (mestrado) – Universidade do Estado de Santa Catarina, Centro de Ciências Tecnológicas, Programa de Pós-Graduação em Física, Joinville, 2015.

1. Modelo de Anderson. 2. Ferromagnetismo. 3. Antiferromagnetismo. 4. Férmons pesados. I. Bernhard, Ben Hur . II. Universidade do Estado de Santa Catarina. Programa de Pós-Graduação em Física. III. Título.

CDD: 530 - 23. ed.

DIOVANA DE MELLO LALIS
DESCRIÇÃO TEÓRICA DO DIAGRAMA DE FASES DOS
COMPOSTOS DE FÉRMIONS PESADOS A PARTIR DO
MODELO DE ANDERSON PERIÓDICO

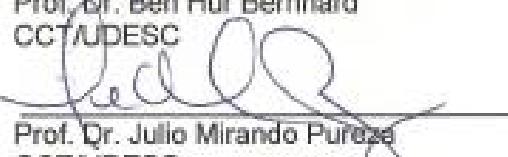
Dissertação apresentada ao Curso de Programa de Pós-Graduação em Física como requisito parcial para obtenção do título de Mestre em Física na área de concentração "Física".

Banca Examinadora

Orientador:


Prof. Dr. Ben Hur Bernhard
CCT/UDESC

Membros


Prof. Dr. Julio Mirando Pureza
CCT/UDESC


Prof. Dr. Eleonir João Calegari
UFSM

Joinville, SC, 26 de fevereiro de 2015.

Agradecimentos

Agradeço primeiramente a Deus por tudo.

Agradeço ao meu orientador Ben Hur pela paciência e pelos seus ensinamentos adquiridos durante esses dois anos.

Agradeço a todos meus colegas da Pós Graduação mas em especial ao Marsal, Su, Grazi e o Anderson pelo companheirismo e pela amizade que nunca vou esquecer.

Aos professores da Pós Graduação em especial professor Holox e Ricardo Zanon.

Agradeço a Nathana Descovi pela atenção, paciência e por me aturar durante esse tempo.

Agradeço a minha família minha mãe Dulce, minha Vó Zaida e minha tia Jandira , para meu pequeno Toninho que a distância e a saudade foi superada mas em especial ao duas pessoas que já se foram ao meu pai Dirceu e me avó Ceceu (Tê) dedico esse trabalho a eles.

Agradeço a UDESC pelo apoio financeiro.

Resumo

Os compostos de férmiuns pesados são geralmente descritos no âmbito do modelo da rede de Kondo, que pode ser derivado a partir do modelo de Anderson. As suas propriedades peculiares são regidas pela competição entre o efeito Kondo e a interação Ruderman-Kittel-Kasuya-Yosida (RKKY), que permite esboçar o diagrama de Doniach. A investigação de compostos ferromagnéticos de férmiuns pesados, em particular, tem se intensificado recentemente, com a possibilidade de aproximação do ponto crítico quântico (QCP) por meio do ajuste da pressão, da concentração de elétrons, ou pela aplicação de campo magnético.

Neste trabalho, o modelo de rede de Anderson (ou modelo de Anderson periódico) é utilizado diretamente para descrever estes compostos, incorporando o efeito das flutuações de valência, que podem desempenhar um papel importante na vizinhança do QCP.

Empregamos o método da equação do movimento para as funções de Green, que permite desacoplamentos sucessivos da cadeia de equações.

Exploramos a estabilidade das soluções de AF, FM e não-magnéticas em função dos parâmetros do modelo, da temperatura e da concentração de elétrons. O diagrama de fases é obtido a partir das curvas de magnetização e pela comparação das energias das soluções envolvidas.

Palavras-chave: *Modelo de Anderson. Ferromagnetismo. Antiferromagnetismo. Férmiuns pesados.*

Abstract

Heavy-fermion compounds are usually described in the framework of the Kondo lattice model, that can be derived from the Anderson model. Their peculiar properties are governed by the competition between the Kondo effect and the Ruderman-Kittel-Kasuya-Yosida (RKKY) interaction, that leads to the Doniach's diagram. The research on ferromagnetic heavy fermion compounds, in particular, has been intensified recently, with the possibility of approaching the quantum critical point (QCP) by tuning pressure, electron concentration, or magnetic field. In this work, the Anderson lattice model (or periodic Anderson model) is used directly to describe these compounds, incorporating the effect of valence fluctuations, which may play an important role in the neighborhood of the QCP.

We employ the Green's functions method, that allows successive decouplings of the chain of equations. We have explored the stability of AF, FM, and non-magnetic solutions as a function of the model parameters, temperature and electron concentration.

The phase diagram is obtained from the magnetization curves and by comparing the energies of the competing solutions.

Keywords: *Anderson Model. Ferromagnetism. Antiferromagnetism. Heavy fermion.*

List of Figures

Figura2.1	Esquema das estruturas de bandas (13).	15
Figura2.2	Densidade de estados (18)	16
Figura2.3	Diagrama de Doniach para compostos FM (11).	19
Figura2.4	Ferromagnetismo em YbCu 2 Si 2 a alta pressão (19).	20
Figura2.5	Ferromagnetismo no ponto crítico quântico (20).	21
Figura4.1	Curvas do n_f, n_c versus n_t na fase PM.	46
Figura4.2	Curva de magnetização versus $\frac{V}{E_f}$ na fase FM para $n_t = 1.9$	47
Figura4.3	Curva de magnetização versus $\frac{V}{E_f}$ na fase AF para $n_t = 1.9$	48
Figura4.4	Curvas de magnetização versus $\frac{V}{E_f}$ nas fases FM e AF para $n_t = 1.5$. .	49
Figura4.5	Curvas de magnetização versus $\frac{V}{E_f}$ nas fases FM e AF para $n_t = 1.0$. .	50
Figura4.6	Diagrama final com as competições das fases FM, AF e K, com $V/t = 0.5$ e $U = 2 E_f $	51
Figura4.7	Comparação das energias da fase FM, AF e PM.	52
Figura4.8	Curva do n_f, n_c versus $\frac{V}{E_f}$, na fase FM para $n_t = 1.9$	53
Figura4.9	Curva de magnetização versus $\frac{V}{E_f}$ na fase AF para $n_t = 1.9$	54
Figura4.10	Curvas de magnetização versus $\frac{V}{E_f}$ nas fases FM e AF para $n_t = 1.8$. .	55
Figura4.11	Diagrama final com a competições das fases FM, AF e K, com $V/t = 0.5$ e $U = 2 E_f $	56
Figura4.12	Diagrama final com a competições das fases FM, AF e K, com $V/t = 0.5$ e $U = 4 E_f $	57
Figura4.13	Comparação das energias da fase FM e AF, com $n_t = 1.90$	58

Contents

1	Introdução	11
2	Modelo de Anderson Periódico	13
2.1	Hamiltoniano do modelo	13
2.2	Motivação Experimental	17
2.2.1	Férmions Pesados	17
2.3	Funções de Green	22
3	Aproximações utilizadas	29
3.1	Aplicação do Modelo de Anderson Periódico	29
3.2	Aproximação de Campo Médio	29
3.2.1	Fase Ferromagnética / Não - magnética	30
3.2.2	Fase Antiferromagnética	33
3.3	Aproximação BL	37
3.3.1	Fase Ferromagnética / Não - magnética	37
3.3.2	Fase Antiferromagnética	39
4	Resultados Obtidos	45
4.1	Aproximação Campo Médio	45
4.2	Aproximação BL	53
5	Conclusão	60
Referências		62
Apêndices		65
A	Comutadores	66

1 Introdução

O modelo de Anderson introduzido na (1) descreve a formação de momentos localizados em metais. Ele trata de uma impureza em uma banda de condução.

O modelo da rede de Anderson ou modelo de Anderson periódico é uma extensão conhecida do modelo proposto em (1), considera um elétron f em cada sítio da rede.

Neste trabalho, investigamos a existência das fases ferromagnética (FM) e antiferromagnética (AF), variando os parâmetros do hamiltoniano do modelo de Anderson periódico. Ao incluir a fase FM, estamos estendendo estudos iniciados em trabalhos anteriores (2), (3), (4) . A partir do cálculo das curvas de magnetizações e energias, construir o diagrama de fase para o Modelo de Anderson Periódico incluindo as fases FM, AF e a fase Kondo ((K) que é fase não-magnética).

No trabalho utilizamos duas aproximações: campo médio (MF) e o desacoplamento Ben Hur- Lacroix (BL)

O hamiltoniano do modelo de Anderson periódico e uma generalização do modelo adotado para descrever uma série de compostos conhecidos genericamente como compostos de férmions pesados.

No capítulo 2, serão feitas análises do Modelo de Anderson Periódico fazendo uma descrição detalhada do modelo, e será realizada a descrição matemática das Funções de Green baseada no formalismo de Zubarev e suas equações de movimento.

No capítulo 3, serão mostrados os cálculos das duas aproximações utilizadas Campo Médio e o desacoplamento BL para as fases FM, AF e K.

No capítulo 4, serão mostrados os resultados numéricos das magnetizações, energias e o diagrama de fases.

No capítulo 5, serão apresentadas as conclusões finais do trabalho e algumas perspectivas futuras para continuação do mesmo.

2 Modelo de Anderson Periódico

2.1 Hamiltoniano do modelo

Os sistemas quânticos que envolvem as impurezas têm sido de grande importância e de interesse nos últimos 60 anos. Em geral, são compostos por dois sub sistemas, um deles constituído por poucos graus de liberdade (a impureza), acoplado a outro dotado de um número muito maior de graus de liberdade do que o primeiro, sendo que ambos devem ser tratados quanticamente.

No ano de 1961, P. W. Anderson introduziu o hamiltoniano do modelo que descreve a formação de momentos localizados em um metal (1). O modelo de Anderson periódico foi estudado pela primeira vez na ref (5).

O hamiltoniano é dado como,

$$\mathcal{H} = E_f \sum_{i\sigma} n_{i\sigma}^f - \sum_{ij\sigma} t_{ij} d_{i\sigma}^\dagger d_{j\sigma} - V \sum_{i\sigma} (f_{i\sigma}^\dagger d_{i\sigma} + h.c.) + U \sum_i n_{i\uparrow}^f n_{i\downarrow}^f \quad (2.1)$$

em que $a_{i\sigma}^\dagger$ e $a_{i\sigma}$ são operadores de criação e destruição considerando um elétron com spin σ no orbital a ($= d$ ou f) no sítio i , $n_{i\sigma}^a = a_{i\sigma}^\dagger a_{i\sigma}$ é o operador número do orbital, E_f é a energia do elétron no orbital f , U é repulsão Coloumbiana entre dois elétrons no mesmo sítio, t_{ij} é denominado o termo do "hopping" do elétron d entre vizinhos mais próximos do sítio j e V é denominado como parâmetro de hibridização entre elétrons d e f .

A figura 2.1 mostra um diagrama esquemático das estruturas de bandas do modelo ilustrando a evolução entre os limites Kondo e de valência intermediária (13).

A figura 2.2 ilustra as densidades de estados obtidas no caso AF para os elétrons de condução e os elétrons f . (2). No ano de 1966, J. R. Schrieffer e P.A Wolff, estabelecem a relação entre o modelo de Anderson de uma impureza e o modelo de Kondo de uma

impureza (6).

O diagrama de Doniach na ref (12) ilustra a competição entre o efeito Kondo e a interação Ruderman-Kittel-Kasuya-Yosida (RKKY), mostrando que o comportamento das temperaturas de Kondo e Néel é seguido experimentalmente por vários compostos de lantanídeos e actinídeos, como o Ce, o Yb e o U de Ce na ref (10).

Poucos trabalhos são encontrados na literatura com uma descrição teórica da fase FM do modelo da rede de Anderson. No ano de 1993, Yanagisawa e Shimoj investigaram o ferromagnetismo no modelo em uma banda semi preenchida. Os resultados relatam uma transição metal-isolante, e sugerem que a repulsão coulombiana desfavorecendo a ordem ferromagnética (17).

Primeiramente, na ref (2) foi aplicada aproximação BL para as fases magnéticas e não-magnéticas, obtendo a dependência das temperaturas de Néel e Kondo no parâmetro do modelo fornecendo uma descrição qualitativa do diagrama de fase da pressão para compostos de férmiuns pesados.

No ano de 2003, Batista, Bonca e Gubernatis, introduziram um mecanismo diferente para o ferromagnetismo itinerante, aparecendo o termo de ferromagnetismo fraco. Outro aspecto interessante da solução ferromagnética seu caráter de valência mista, na ref (24).

Na fase Antiferromagnética temos uma abordagem mais significativa na parte teórica e na sua metodologia, com métodos mais simples como no caso da aproximação do campo médio e aproximações muito mais complexas como será mostrado o capítulo (3).

No ano de 2009, Bernhard e Coqblin estudaram a fase AF do modelo da rede de Anderson, aplicando o método da equação de movimento. Foi estudada a destruição da fase AF em função da dopagem em torno de $n = 2$ (banda semi preenchida). Foi obtida uma transição de valência gradual induzida pela pressão (2).

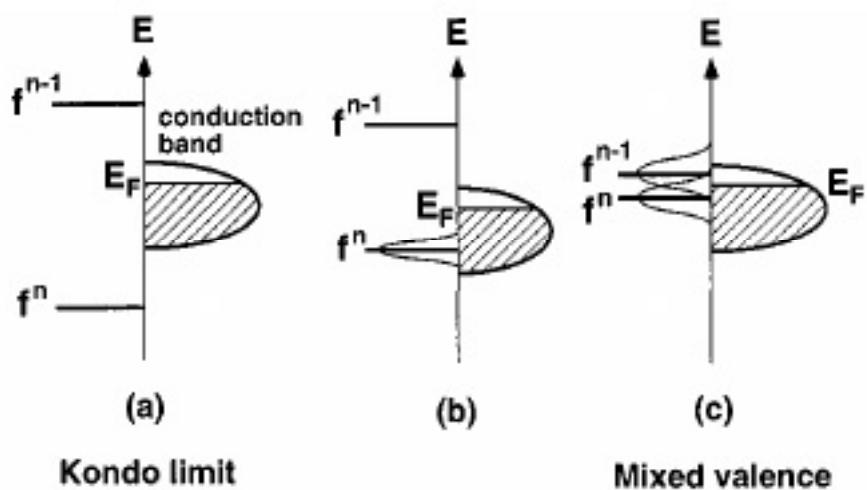


Figure 2.1 – Esquema das estruturas de bandas (13).

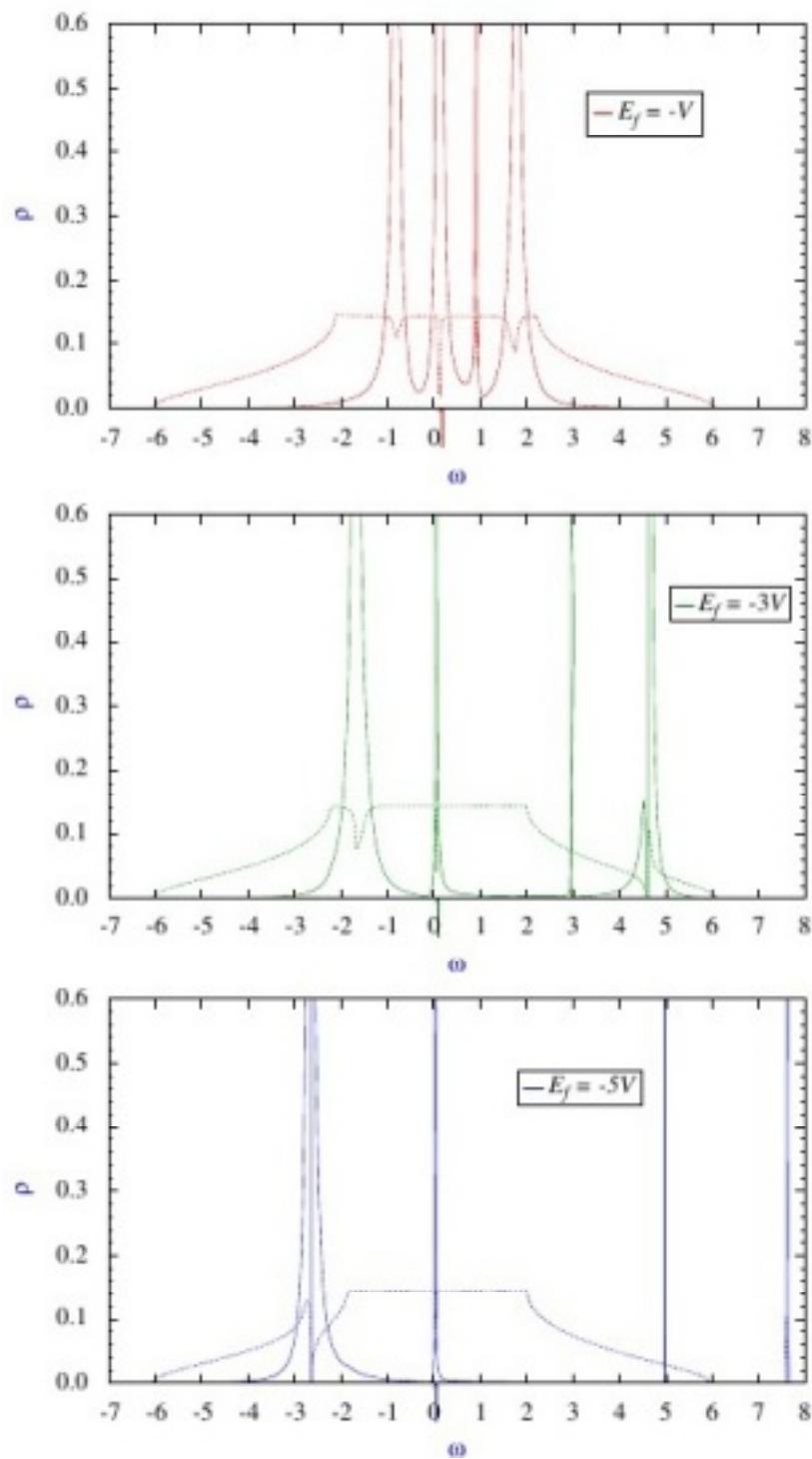


Figure 2.2 – Densidade de estados (18) .

2.2 Motivação Experimental

2.2.1 Férmiões Pesados

Os férmiões pesados constituem uma família de compostos de Ce, Yb, U, que apresentam propriedades eletrônicas peculiares. Alguns deles apresentam ordem magnética (geralmente AF) à baixa temperatura.

O modelo de Anderson proposto neste trabalho em uma generalização do modelo adotado para descrever uma série de compostos conhecidos genericamente como compostos de férmiões pesados.

A tabela 2.1, descreve uma série de compostos de Ce.

Compound	Order	θ_{CW} (K)	T_{N} (K)	T_{C} (K)	T_{K} or T_{sf} (K)	γ (J/Ce mol K ²)
Ce ₂ Ni ₂ In	VF				92	0.016
Ce ₂ Ni ₂ Cd	VF	−5.2				
Ce ₂ Ni ₂ Mg	VF					
Ce ₂ Rh ₂ In	VF				201	0.0125
Ce ₂ Rh ₂ Cd	VF					
Ce ₂ Cu ₂ In	AF	−7.7	5.5		6	
Ce ₂ Pd ₂ Sn	AF/FM	18	4.8	2.2	3	0.1
Ce ₂ Pt ₂ In	SG	−8.4	0.5			0.25
Ce ₂ Pd ₂ Cd	AF	21.2	4.6			
Ce ₂ Pd ₂ In	AF/FM	12.3	4.3	4	6	
Ce ₂ Pt ₂ Pb	QCP	−14	—			0.6
Ce ₂ Si ₂ Mg	AF/FM(?)	−19	12			0.07
Ce ₂ Pd ₂ Pb	AF	−30	6.2			
Ce ₂ Ge ₂ Mg	AF	22	9.4			0.04
Ce ₂ Ge ₂ In	FM(?)	−9.2		14		
Ce ₂ Au ₂ Cd	AF	−3.3	5			0.4
Ce ₂ Au ₂ In	AF	−15.7	3.2		4.5	0.0185

Table 2.1 – Tabela com composto de Cério.

No ano de 1981, A. Eiling e J.S. Schilling, propôs um diagrama de Doniach para compostos FM. O modelo de Anderson Periódico foi originalmente estudado na (8). A sua relação com o modelo da rede de Kondo foi discutida (9).

A figura 2.3, mostra o diagrama de Doniach para certos compostos ferromagnéticos de Ce. O diagrama de Doniach é entendido no contexto da rede de Kondo. Olhando para o diagrama no eixo x, temos a pressão dada pelo parâmetro J . No nosso estudo, conforme proposto na ref. (1), a pressão é representada pelo parâmetro $V/|Ef|$. Os compostos são situados em um diagrama hipotético, encontrando-se na fase FM a pressão ambiente na ref (11).

A figura 2.4 mostra um diagrama de fases em 3 dimensões contendo três parâmetros a serem estudados: a pressão, o campo magnético e a temperatura, contendo uma região FM. À pressão ambiente, temos uma região não-magnética. Quando aplicamos a uma determinada pressão, a região se torna ferromagnética. A ordem ferromagnética é destruída com o aumento da temperatura. Na ausência de campo magnético, a magnetização sofre uma transição descontínua. Se aplicarmos o campo magnético, podemos ajustar a região e encontrar o Ponto Crítico Quântico (QCP) (19).

A figura 2.5, mostra outro estudo recente relacionado à existência de um ponto crítico quântico ferromagnético no composto com Yb. (20).

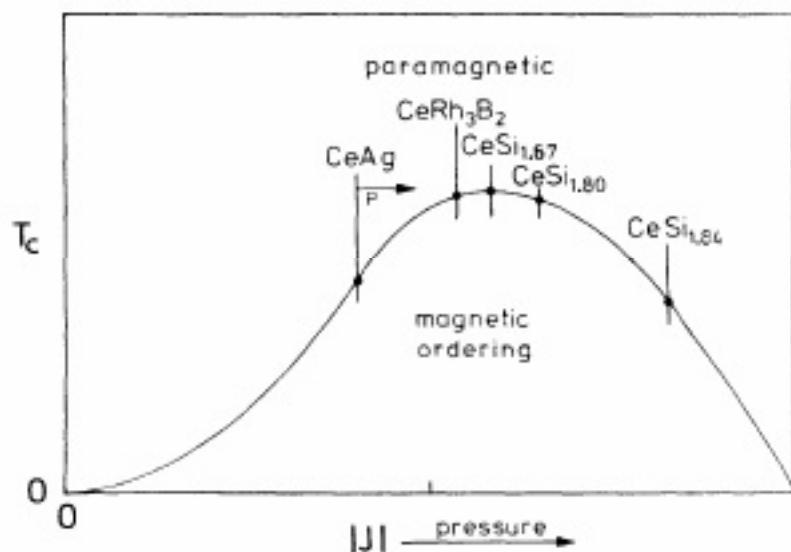


Figure 2.3 – Diagrama de Doniach para compostos FM (11).

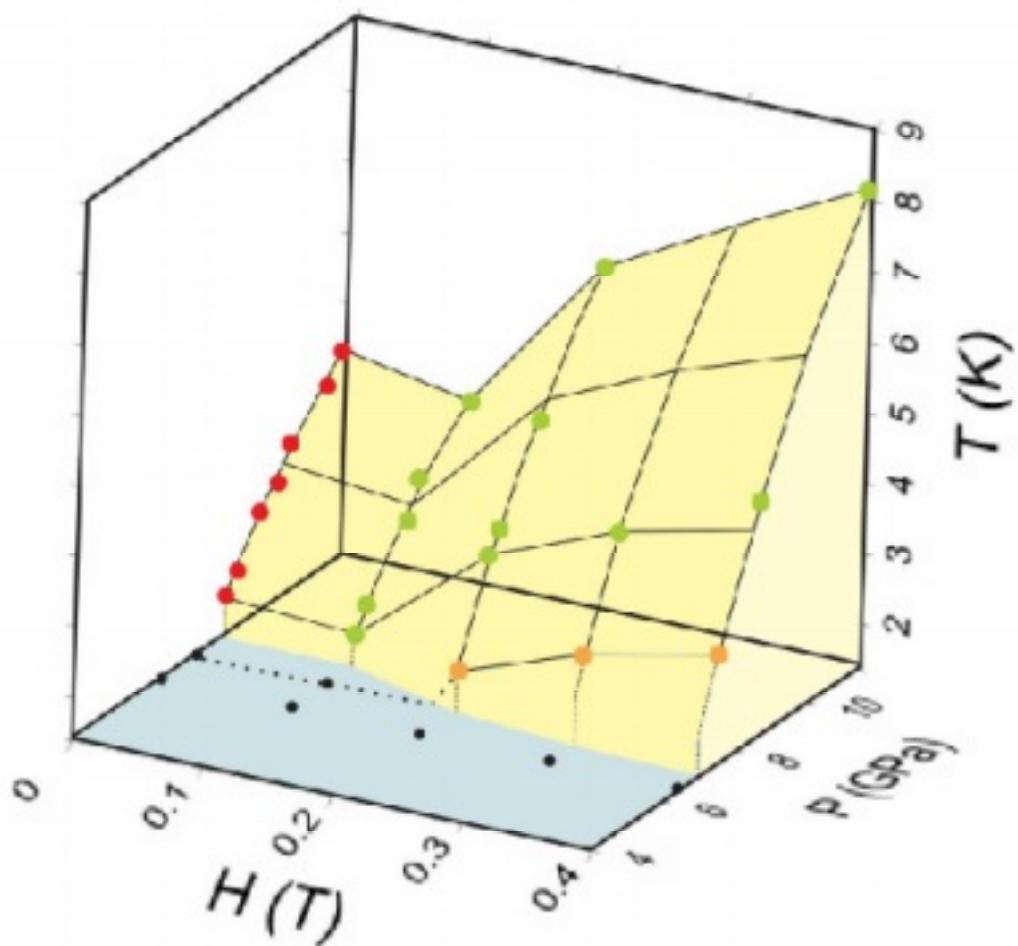


Figure 2.4 – Ferromagnetismo em YbCu₂Si₂ a alta pressão (19).

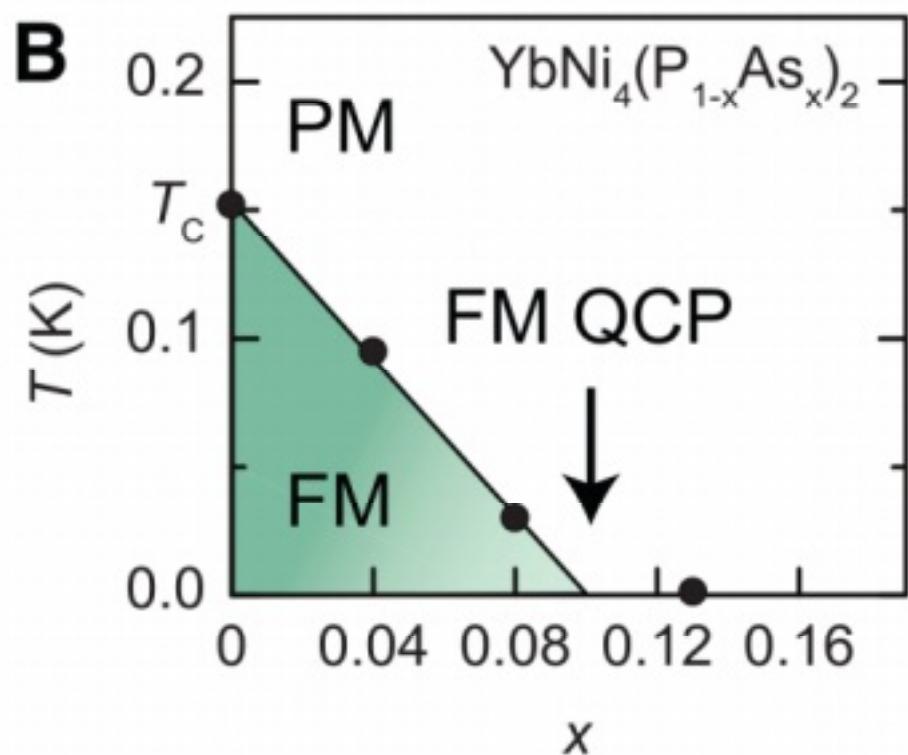


Figure 2.5 – Ferromagnetismo no ponto crítico quântico (20).

2.3 Funções de Green

Nesse trabalho utilizamos a técnica das funções de Green, sendo uma ferramenta matemática muito utilizada para analisar sistemas de muitos corpos na mecânica quântica.

Podemos utilizar a técnica das funções de Green como uma ferramenta matemática podendo analisar algumas descrições das propriedades termodinâmicas do estado fundamental descrito até a sua temperatura crítica. Essa técnica, se deu origem a partir da teoria de campos desenvolvida por Abrikosov Gorkov e Dzyaloshinski no ano de 1975. Os cálculos apresentados abaixo são baseado (16).

Introduzindo o formalismo de Zubarev, nesse capítulo será desenvolvida uma descrição para as funções de Green retardada e avançada, após serão desenvolvidas as equações do movimento para ambas.

Na mecânica estatística obtemos as Funções de Green através das médias sobre o ensemble estatístico. As funções de Green dependem da temperatura e do tempo. Podemos escrever as funções de Green como retardada e avançada.

Podemos definir as funções de Green retardada $G_r(t, t')$ e avançada $G_a(t, t')$ definidas como,

$$G_{AB}(t, t') = \ll \hat{A}(t); \hat{B}(t') \gg_r = -i\theta(t - t') \langle [\hat{A}(t), \hat{B}(t')] \rangle \quad (2.2)$$

e

$$G_{AB}(t, t') = \ll \hat{A}(t); \hat{B}(t') \gg_a = i\theta(t' - t) \langle [\hat{A}(t), \hat{B}(t')] \rangle, \quad (2.3)$$

onde o termo $\langle \dots \rangle$ indica uma média sobre o ensemble grande canônico e $\ll \hat{A}(t); \hat{B}(t') \gg_{r,a}$ utilizamos como uma notação para identificar as funções de Green. A função $\theta(t)$ é a

função degrau e satisfazem as seguintes condições:

$$\theta(t) = \begin{cases} 1 & \text{se } t > 0 \\ 0 & \text{se } t < 0. \end{cases} \quad (2.4)$$

Os operadores $\hat{A}(t)$ e $\hat{B}(t)$ podem ser expressos da seguinte forma (em um sistema com unidades de $\hbar = 1$):

$$\hat{A}(t) = e^{i\hat{\mathcal{H}}t} \hat{A} e^{-i\hat{\mathcal{H}}t} \quad (2.5)$$

e

$$\hat{B}(t') = e^{i\hat{\mathcal{H}}t'} \hat{B} e^{-i\hat{\mathcal{H}}t'}. \quad (2.6)$$

O hamiltoniano $\hat{\mathcal{H}}$ é escrito como:

$$\hat{\mathcal{H}} = \hat{H} - \mu \hat{N} \quad (2.7)$$

onde μ é o potencial químico, \hat{N} é o operador número de partículas e \hat{H} é um operador hamiltoniano independente do tempo.

Os operadores $[\hat{A}, \hat{B}]$ obedecem a seguinte relação de comutação:

$$[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \eta \hat{B}\hat{A} \quad (2.8)$$

com $\eta = \pm 1$. Analisando o sinal de η dependendo se \hat{A} e \hat{B} são operadores que obedecem a estatística de Fermi-Dirac ($\eta = -1$) ou de Bose-Einstein ($\eta = +1$). Reescrevendo as equações 2.2 e 2.3 em conjunto com a equação 2.8 obtém-se as funções de Green na seguinte forma:

$$G_{AB}(t, t') = -i\theta(t - t') \{ \langle \hat{A}(t)\hat{B}(t') \rangle - \eta \langle \hat{B}(t')\hat{A}(t) \rangle \} \quad (2.9)$$

e

$$G_{AB}(t, t') = i\theta(t' - t) \{ \langle \hat{A}(t)\hat{B}(t') \rangle - \eta \langle \hat{B}(t')\hat{A}(t) \rangle \}. \quad (2.10)$$

As equações 2.9 e 2.10 não são definidas se $t = t'$, devido a uma descontinuidade na função degrau 2.4 que não é definida para $t = t'$. Por outro lado, quando temos $t \neq t'$ podemos

analisar dois casos:

$$G_r(t, t') = 0 \quad \text{se} \quad t < t' \quad (2.11)$$

$$G_a(t, t') = 0 \quad \text{se} \quad t > t'. \quad (2.12)$$

No equilíbrio termodinâmico, onde $t = t'$ essas funções de Green dependem de t e t' somente através da diferença $(t - t')$.

Para demonstrar tal afirmação considera-se um operador \hat{O} qualquer. A média de uma variável física representada pelo operador \hat{O} é definida pela seguinte expressão:

$$\langle \hat{O} \rangle = \frac{\text{Tr}\{\hat{O}e^{-\beta\hat{H}}\}}{Z} \quad (2.13)$$

sendo $Z = \text{Tr}\{e^{-\beta\hat{H}}\}$ a função de partição para o ensemble grande canônico e $\beta = \frac{1}{k_B T}$, sendo T a temperatura e k_B a constante de Boltzmann. Da mesma forma, $\langle \hat{A}(t)\hat{B}(t') \rangle$ é definida pela equação,

$$\langle \hat{A}(t)\hat{B}(t') \rangle = \frac{1}{Z} \text{Tr}\{e^{-\beta\hat{H}}e^{i\hat{H}t}\hat{A}e^{-i\hat{H}t}e^{i\hat{H}t'}\hat{B}e^{-i\hat{H}t'}\} \quad (2.14)$$

na qual pode-se trocar ciclicamente os operadores dentro da operação traço:

$$\langle \hat{A}(t)\hat{B}(t') \rangle = \frac{1}{Z} \text{Tr}\{e^{-\beta\hat{H}}e^{i\hat{H}(t-t')}\hat{A}e^{-i\hat{H}(t-t')}\hat{B}\} \quad (2.15)$$

e obtém-se:

$$\langle \hat{A}(t)\hat{B}(t') \rangle = \frac{1}{Z} \text{Tr}\{e^{-\beta t}\hat{A}(t-t')\hat{B}\} \quad (2.16)$$

o que permite escrever as funções de Green como,

$$\ll \hat{A}(t)\hat{B}(t') \gg = \ll \hat{A}(t-t'); \hat{B}(0) \gg \quad (2.17)$$

ou ainda

$$G_{AB}(t, t') = G_{AB}(t - t') \quad (2.18)$$

$$G_{AB}(t, t') = G_{AB}(t - t') \quad (2.19)$$

mostrando que as funções de Green dependem de t e t' apenas através da diferença $(t - t')$.

Definidas as funções retardada e avançada, podemos calcular as suas respectivas equações de movimento.

Os operadores $\hat{A}(t)$ e $\hat{B}(t)$ na representação de Heisenberger $\hbar = 1$, satisfazem a equação de movimento, onde obtemos:

$$i \frac{d}{dt} \hat{A} = \hat{A} \hat{H} - \hat{H} \hat{A} \quad (2.20)$$

Derivando em relação ao tempo t as funções de Green, definidas nas equações 2.2 e 2.3, obtém-se a equação de movimento:

$$i \frac{d}{dt} G_{AB} = \frac{d}{dt} \theta(t - t') \langle [\hat{A}(t), \hat{B}(t')] \rangle + \ll i \frac{d}{dt} \hat{A}(t); \hat{B}(t') \gg \quad (2.21)$$

A transformada de Fourier em $G(t - t')$ e obter $G(\omega)$ é válida para ambas as funções de Green, uma vez que $\frac{d\theta(-t)}{dt} = -\frac{d\theta(t)}{dt}$. Usando a relação:

$$\theta(t) = \int_{-\infty}^t \delta(\tau) d\tau \quad (2.22)$$

em que $\tau = t - t'$ e

$$\delta(\tau) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ix\tau} dx \quad (2.23)$$

reescrevemos a equação 2.21 como:

$$i \frac{d}{dt} G_{r,a} = \delta(t - t') \langle [\hat{A}(t), \hat{B}(t')] \rangle + \ll i \frac{d}{dt} \hat{A}(t); \hat{B}(t') \gg . \quad (2.24)$$

Considerando a equação de movimento dada pela equação 2.21 é possível reescrever a equação 2.25 na seguinte forma:

$$i \frac{d}{dt} G_{AB} = \delta(t - t') \langle [\hat{A}(t), \hat{B}(t')] \rangle + \ll \{ \hat{A}(t) \hat{H}(t) - \hat{H}(t) \hat{A}(t) \}; \hat{B}(t') \gg . \quad (2.25)$$

A transformada de Fourier temporal tem a forma:

$$G_{AB}(\omega) = \ll A; B \gg_{\omega} \quad (2.26)$$

$$G_{AB}(\omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i\omega(t-t')} G_{AB}(t, t') d(\tau), \quad (2.27)$$

A transformada inversa é,

$$G_{AB}(t, t') = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-i\omega(t-t')} G_{AB}(\omega) d\omega \quad (2.29)$$

Derivando a equação 2.25, obtemos

$$i \frac{\partial G_{AB}(t, t')}{\partial t} = \delta(t - t') \langle [A(t), B(t')]_+ \rangle + \ll [A(t), H^-]; B(t') \gg, \quad (2.30)$$

ou seja:

$$i \frac{\partial G_{AB}(t, 0)}{\partial t} = \delta(t) \langle [A(t), B(0)]_+ \rangle + \ll [A(t), H^-]; B(0) \gg, \quad (2.32)$$

vamos obter a transformada de Fourier da equação acima, calculando a transformada para cada termo da equação:

$$\begin{aligned} \mathcal{F} \left\{ i \frac{\partial G_{AB}(t)}{\partial t} \right\} &= i \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega t} \frac{\partial G_{AB}(t)}{\partial t} dt, \\ &= i \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial}{\partial t} [e^{i\omega t} G_{AB}^{\sigma}(t)] dt - i^2 \omega \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega t} G_{ij}(t) dt, \\ &= -i\omega \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega t} \Theta(t) \langle [A(t), B(0)]_+ \rangle dt, \\ &= \omega G_{AB}(\omega); \end{aligned} \quad (2.33)$$

$$\begin{aligned}
\mathcal{F}\{\delta(t)\langle[A(t), B(0)]_+\rangle\} &= \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega t} \delta(t) \langle[A(t), B(0)]_+\rangle dt, \\
&= \langle[A, B]_\eta\rangle,
\end{aligned} \tag{2.34}$$

$$\begin{aligned}
\mathcal{F}\{\ll[A(t), H]; B(0)\gg\} &= \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega t} \ll[A(t), H]; B(0)\gg dt, \\
&= \ll[A, H]; B\gg,
\end{aligned} \tag{2.35}$$

portanto:

$$\omega G_{AB}(\omega) = [A, B]_\eta + \ll[A, H]; B\gg \tag{2.36}$$

Podemos notar que quando temos uma equação de movimento da função de Green $G_{r,a}$ para dois operadores essa depende de uma novas funções de Green ordem superior.

Se as novas funções de Green forem diferenciadas para obter sua respectivas equações de movimento, surgirá novas funções de Green, de ordem maior ainda. Se esse processo for repetido infinitas vezes, será gerado um conjunto infinito de equações acopladas. Portanto, é necessário tratar essas equações de movimento para reduzir um conjunto infinito de equações de movimento para um número finito de equações.

Nos próximos capítulos, este método será aplicado ao modelo de Anderson periódico, dentro das aproximações MF e BL.

3 Aproximações utilizadas

Neste capítulo, faremos a utilização de duas aproximações: aproximação do campo médio e o desacoplamento BL. Ambas aproximações serão abordadas tanto para as fases Ferromagnéticas/Paramagnéticas e Antiferromagnéticas, seus cálculos serão demonstrados abaixo para cada aproximação.

3.1 Aplicação do Modelo de Anderson Periódico

Podemos aplicar a transformada de Fourier na equação do movimento,

$$\omega G_{AB}(\omega) = \langle A, B \rangle + \ll [A, H]; B \gg_{\omega} \quad (3.1)$$

Aplicando as funções de Green no modelo de Anderson periódico, $A = c_{i\sigma}$, $B = c_{j\sigma^\dagger}$, podemos representar a função de green de ordem zero como $G_{ij}^\sigma = \ll c_{i\sigma}, c_{j\sigma^\dagger} \gg_{\omega}$.

3.2 Aproximação de Campo Médio

Podemos desacoplar no primeiro passo, utilizando como exemplo o hamiltoniano do modelo de anderson periódico porque são termos de uma partícula, então,

$$n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} = \langle n_{i\uparrow} \rangle n_{i\downarrow} + \langle n_{i\downarrow} \rangle n_{i\uparrow} + \langle n_{i\uparrow} \rangle \langle n_{i\downarrow} \rangle \quad (3.2)$$

As equações de movimento para o campo médio é dada por,

$$\omega \ll c_{i\sigma}; c_{j\sigma}^\dagger \gg = \delta_{ij} - V \ll f_{i\sigma}; c_{j\sigma}^\dagger \gg - \sum_k t_{ik} \ll c_{k\sigma}; c_{j\sigma}^\dagger \gg \quad (3.3)$$

$$(\omega - E_F) \ll f_{i\sigma}; c_{j\sigma}^\dagger \gg = -V \ll c_{i\sigma}; c_{j\sigma}^\dagger \gg + U \ll n_{i\bar{\sigma}}^f f_{i\sigma}; c_{j\sigma}^\dagger \gg \quad (3.4)$$

$$(\omega - E_F) \ll f_{i\sigma}; f_{j\sigma}^\dagger \gg = \delta_{ij} - V \ll c_{i\sigma}; f_{j\sigma}^\dagger \gg + U \ll n_{i\bar{\sigma}}^f f_{i\sigma}; f_{j\sigma}^\dagger \gg \quad (3.5)$$

$$\omega \ll c_{i\sigma}; f_{j\sigma}^\dagger \gg = -V \ll f_{i\sigma}; f_{j\sigma}^\dagger \gg - \sum_k t_{ik} \ll c_{k\sigma}; f_{j\sigma}^\dagger \gg \quad (3.6)$$

3.2.1 Fase Ferromagnética / Não - magnética

Podemos definir o Ferromagnetismo como sendo a propriedade das partículas interagentes de se alinharem espontaneamente com a direção dos seus spins. Considerando que o Hamiltoniano que descreve o sistema é invariante frente à sua rotação, mas sim devemos considerar a configuração que minimiza a energia, os spins se alinham parcialmente ou completamente.

A magnetização é o parâmetro que podemos associar a quebra de simetria em uma direção qualquer.

Substâncias Ferromagnéticas possuem um momento magnético espontâneo, que existem mesmo na ausência de um campo magnético aplicado. Podemos diferenciar a fase ferromagnética e paramagnética pela invariância translacional.

Escrevendo a magnetização como,

$$m_f = \langle n_{i\uparrow}^f \rangle - \langle n_{i\downarrow}^f \rangle \quad (3.7)$$

onde, $\langle n_{i\sigma}^f \rangle$ será igual em todos os sítios.

Na fase Ferromagnética e Antiferromagnética, utilizaremos uma hibridização local, escrita como,

$$V_{ik} = \delta_{ik} V \quad (3.8)$$

Na aproximação do campo médio para a fase ferromagnética temos as seguintes equações de movimento já com a transformada de Fourier para o modelo de Anderson Periódico, a expansão atômica efetiva, será,

$$\omega G_{ij\sigma}^{cc} = \delta_{ij} g_{dd}^\sigma - g_{dd}^\sigma \sum_k t_{ik} G_{kj\sigma}^{cc} \quad (3.9)$$

$$(\omega - E_f - U \langle n_{i\sigma}^f \rangle) G_{ij\sigma}^{fc} = - \sum_k V_{ik} G_{kj\sigma}^{fc} \quad (3.10)$$

$$(\omega - E_f - U \langle n_{i\sigma}^f \rangle) G_{ij\sigma}^{ff} = \delta_{ij} g_{cf}^\sigma - \sum_k V_{ik} G_{kj\sigma}^{ff} \quad (3.11)$$

Fazendo a transformada de Fourier temos as seguintes equações:

$$\omega G_\sigma^{cc}(q) = g_{dd} [1 - \epsilon(q) G_\sigma^{cc}(q)] \quad (3.12)$$

$$Q_1^\sigma G_\sigma^{fc}(q) = V(q) G_\sigma^{cc}(q)$$

$$Q_1 G_\sigma^{ff}(q) = g_{dd} [1 - \epsilon(q) G_\sigma^{ff}(q)]$$

onde,

$$\varepsilon(\mathbf{q}) = -2t(\cos q_x a + \cos q_y a + \cos q_z a) \quad (3.13)$$

É a relação de dispersão de uma rede cúbica. Temos um conjunto de equações de movimento (3.4), colocando em evidência o $G\sigma^{fc}(q)$ e substituindo na primeira equação ficamos com,

$$\omega Q_1^\sigma G_\sigma^{cc}(q) = Q_1^c + Q_1 \sigma \epsilon(q) G_\sigma^{cc}(q) + V^2(q) G_\sigma^{cc}(q) \quad (3.14)$$

onde o termo da equação Q_1^σ denominado como raíz do polinômio de primeiro grau, pode ser escrito como,

$$Q_1^\sigma = \omega - E_f - U \langle n_{i\sigma}^f \rangle \quad (3.15)$$

podemos escrever o termo da equação $G_\sigma^{cc}(q)$ como,

$$G_\sigma^{cc}(q) = \frac{Q_1^\sigma}{P_2^\sigma} \quad (3.16)$$

Podemos escrever o termo $P_2^\sigma = [\omega - \epsilon(q)]Q_1^\sigma - V^2(q)$. Como trata-se de um polinômio do segundo grau temos duas raízes da equação, sendo,

$$\omega_+ = \frac{1}{2} [\epsilon(q) + E_f + U < n_{i\sigma}^f >] + \frac{1}{2} \sqrt{[\epsilon(q) + E_f + U < n_{i\sigma}^f >]^2 + V^2(q)} \quad (3.17)$$

e

$$\omega_- = \frac{1}{2} [\epsilon(q) + E_f + U < n_{i\sigma}^f >] - \frac{1}{2} \sqrt{[\epsilon(q) + E_f + U < n_{i\sigma}^f >]^2 + V^2(q)} \quad (3.18)$$

Alternativamente para as funções de Green $G_{ij\sigma}^{fc}$, $G_{ij\sigma}^{cf}$ e $G_{ij\sigma}^{ff}$, então podemos escrever como,

$$G_{ij\sigma}^{fc} = -\frac{1}{Q_1} \sum_k V_{ik} G_{kj\sigma}^{cc} \quad (3.19)$$

$$G_{ij\sigma}^{cf} = -\frac{1}{Q_1} \sum_k V_{ik} G_{kj\sigma}^{cf} \quad (3.20)$$

$$G_{ij\sigma}^{ff} = \frac{\omega - \epsilon}{P_2(\omega)} \quad (3.21)$$

3.2.2 Fase Antiferromagnética

Nas substâncias antiferromagnéticas, existem duas sub-redes com momentos iguais e opostos, o que faz com que o momento total seja zero mesmo abaixo da temperatura de ordenação, conhecida como temperatura de Néel.

Temos o seguinte conjunto de equações de movimento para esse caso,

$$\omega G_{ij\sigma}^{cc} = \delta_{ij} - \sum_k t_{ik} G_{kj\sigma}^{cc} - V G_{ij\sigma}^{fc} \quad (3.22)$$

$$Q_{1A}^\sigma G_{ij\sigma}^{fc} = -V G_{ij\sigma}^{cc}$$

onde,

$$Q_1 = \omega - E_f - U < n_{i\sigma}^f > \quad (3.23)$$

Reorganizando as equações, temos,

$$\omega Q_{1A}^\sigma G_{ij\sigma}^{cc} = (\delta_{ij} - \sum_k t_{ik} G_{kj\sigma}^{cc}) Q_{1A}^\sigma + V^2 G_{ij\sigma}^{cc} \quad (3.24)$$

Escrevendo o termo $G_{ij\sigma}^{cc}$, como,

$$G_{ij\sigma}^{cc} = g_A^\sigma \delta_{ij} - \sum_k t_{ik} G_{kj\sigma}^{cc} \quad (3.25)$$

onde, g_A^σ , pode escrita como,

$$g_A^\sigma = \frac{Q_{1A}^\sigma}{\omega Q_{1A}^\sigma - V^2} \quad (3.26)$$

Para simplificar a equação (3.16), podemos escrever o termo do dividendo como, Q_{2A}^σ ,

$$Q_{2A}^\sigma = \omega Q_{1A}^\sigma - V^2 \quad (3.27)$$

Fazendo a transformada de Fourier, da equação acima temos,

$$G_{\sigma}^{cc}(q) = \frac{g^{\sigma}}{1 - \epsilon(q)g^{A\sigma}} \quad (3.28)$$

Podemos escrever a equação (3.18) em termos dos polinômios, Q_{1A}^{σ} e P_2^{σ} . Reescrevendo a equação (3.18), temos,

$$G_{\sigma}^{cc}(q) = \frac{g^{\sigma}}{1 - \epsilon(q)g^{\sigma}} = \frac{Q1A^{\sigma}}{P_2^{\sigma}} \quad (3.29)$$

Reescrevendo o termo da equação P_2^{σ} , temos,

$$P_2^{\sigma} = \omega Q_{1A}^{\sigma} - -V^2 - \epsilon(q)Q_{1A}^{\sigma} \quad (3.30)$$

Considerando o limite para $V(q) = -V$. Temos na fase Antiferromagnética,

$$G_{kj\sigma}^{cc} = -g_B^{\sigma} \sum_l t_{kl} G_{lj\sigma}^{cc} \quad (3.31)$$

e

$$G_{ij\sigma}^{cc} = g_A^{\sigma} \delta_{ij} - \sum_l t_{il}^* G_{lj\sigma}^{cc} \quad (3.32)$$

onde, t_{il}^* , pode ser escrito como,

$$t_{il}^* = g_B^{\sigma} \sum_k t_{ik} t_{kl} \quad (3.33)$$

Fazendo a transformada de Fourier, temos,

$$G_{A\sigma}^{cc}(q) = \frac{g_A^{\sigma}}{1 - \epsilon_A^*(q)g_A^{\sigma}} \quad (3.34)$$

Podemos escrever a equação (3.25) de outra maneira,

$$G_{A\sigma}^{cc}(q) = \frac{g_A^{\sigma}}{1 - g_A^{\sigma}g_B^{\sigma}\epsilon_A^2(q)} \quad (3.35)$$

O termo $g_{A\sigma}$ pode ser escrito como,

$$g_{A\sigma} = \frac{(g_{A\sigma}^f)^{-1}}{(g_{A\sigma}^c)^{-1}(g_{A\sigma}^f)^{-1} - V^2} \quad (3.36)$$

Ou pode ser escrito me termos de polinômios, como,

$$G_{A\sigma}^{cc}(q) = \frac{q_1^A(\omega)}{p_2^A(\omega)} \quad (3.37)$$

Retomando a equação (3.26), podemos escrever o termo $g_{A\sigma}^f$, como,

$$g_{A\sigma}^f = (\omega - E_f - U < n_{A\sigma}^f >)^{-1} \quad (3.38)$$

Também podemos escrever o termo $g_{A\sigma}^c$, como,

$$g_{A\sigma}^c = \omega^{-1} \quad (3.39)$$

Fazendo a Transformada de Fourier , temos,

$$G^\sigma(q) = \frac{1}{N} \sum_{ij} e^{-i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)} G_{ij}^\sigma \quad (3.40)$$

para $i, j \in A$, escrevendo, ϵ^* e ϵ como,

$$\epsilon^*(q) = -\frac{1}{N} \sum_{ij} e^{-i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)} t_{ij}^* \quad (3.41)$$

$$\epsilon(q) = -\frac{1}{N} \sum_{ik} e^{-i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_k)} t_{ik} \quad (3.42)$$

para $k \in B$.

Reescrevendo ϵ^* , temos

$$\epsilon^* = +g_B^\sigma \frac{1}{N} \sum_{kij} e^{-i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)} t_{ik} t_{kj} \quad (3.43)$$

$$\epsilon_A^*(q) = g_B^\sigma [\epsilon(q)]^2 \quad (3.44)$$

Fazendo a Transformada Inversa temos,

$$G^{ij\sigma}(q) = \frac{1}{N} \sum_q e^{-i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)} G^\sigma(q) \quad (3.45)$$

Renormalizando,

$$t_{il}^* = -g_B^\sigma \sum_k t_{ik} t_{kl} \quad (3.46)$$

onde,

$$G_{ij}^\sigma = g_A^\sigma \delta_{ij} - \sum_l t_{il}^* G_{lj}^\sigma \quad (3.47)$$

$$G_{ij}^\sigma = g_A^\sigma \delta_{ij} - t_{ii}^* G_{ij}^\sigma - \sum_{li} t_{il}^* G_{lj}^\sigma \quad (3.48)$$

onde, l é diferente de i .

Aplicando a transformada de Fourier temos,

$$G_A^\sigma(q) = g_A^\sigma 1 + \epsilon^*(q) G_A^\sigma(q) \quad (3.49)$$

Encontramos as equações (3.29) e (3.30).

Por fim, podemos escrever os termos restantes das funções de Green, para simplificar os cálculos notamos que as funções de Green $G_{A\sigma}^{cf} = G_{A\sigma}^{fc}$ e também $G_{A\sigma}^{ff}$ como,

$$G_{A\sigma}^{cf} = G_{A\sigma}^{fc} = -V g_{A\sigma}^f G_{A\sigma}^{cc} \quad (3.50)$$

e

$$G_{A\sigma}^{ff} = g_{A\sigma}^f [1 - V G_{A\sigma}^{cf}] \quad (3.51)$$

Podemos escrever em termos dos polinômios,

$$G_{A\sigma}^{cf} = G_{A\sigma}^{fc} = \frac{Q_0(\omega)}{P_4(\omega)} \quad (3.52)$$

e

$$G_{A\sigma}^{ff} = \frac{Q'_3(\omega)}{P_4(\omega)} \quad (3.53)$$

Tendo a expressão da energia para o Campo Médio,

$$E = E_f n_f - 6t \sum_\sigma \gamma_\sigma - 2V \sum_\sigma \lambda_\sigma + U \langle n_\sigma^f \rangle \langle n_\sigma^f \rangle \quad (3.54)$$

onde γ_σ é o meu valor médio $\langle c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} \rangle$ e λ_σ é o termo cruzado f e c é $\langle f_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma} \rangle$.

3.3 Aproximação BL

3.3.1 Fase Ferromagnética / Não - magnética

Podemos definir o Ferromagnetismo como sendo a propriedade das partículas interagentes de se alinharem espontaneamente com a direção dos seus spins. Considerando que o Hamiltoniano que descreve o sistema é invariante frente à sua rotação, mas sim devemos considerar a configuração que minimiza a energia, os spins se alinham parcialmente ou completamente.

A magnetização é o parâmetro que podemos associar a quebra de simetria em uma direção qualquer.

Substâncias Ferromagnéticas possuem um momento magnético espontâneo que existe mesmo na ausência de um campo magnético aplicado.

Escrevendo a magnetização como,

$$m_f = \langle n_{i\uparrow}^f \rangle - \langle n_{i\downarrow}^f \rangle \quad (3.55)$$

onde, $\langle n_{i\sigma}^f \rangle$ será igual em todos os sítios.

Utilizando a transformada de Fourier, temos:

$$G_{ij\sigma}^{ab}(\omega) = \frac{1}{N} \sum G_{\sigma}^{ab}(\mathbf{q}, \omega) e^{-i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)} , \quad (3.56)$$

obtemos,

$$G_{\sigma}^{dd}(\mathbf{q}, \omega) = \frac{Q_3^{\sigma}(\omega)}{P_4(\mathbf{q}, \omega, \cdot)} \quad (3.57)$$

$$G_{\sigma}^{fd}(\mathbf{q}, \omega) = -V \frac{Q_2^{\sigma}(\omega)}{P_4(\mathbf{q}, \omega)} , \quad (3.58)$$

$$G_{\sigma}^{ff}(\mathbf{q}, \omega) = [\omega - \varepsilon(\mathbf{q})] \frac{Q_2^{\sigma}(\omega)}{P_4(\mathbf{q}, \omega)} , \quad (3.59)$$

onde,

$$P_4^{\sigma}(\mathbf{q}, \omega) = Q_4(\omega) - Q_3^{\sigma}(\omega) \varepsilon(\mathbf{q}) \quad (3.60)$$

e

$$\varepsilon(\mathbf{q}) = -2t(\cos q_x a + \cos q_y a + \cos q_z a) . \quad (3.61)$$

As equações 3.57 - 3.60 as equações podem ser escritas sob a forma,

$$G_{\sigma}^{ab}(E, \omega) = \sum_{i=1}^4 \frac{A_i^{ab}(E)}{\omega - p_i(E)} \quad (3.62)$$

onde $p_i(E)$ é uma raiz do polinômio de quarto grau. $P_4^{\sigma}(E, \omega)$. As funções de Green local e as médias são dadas como:

$$G_{i\sigma}^{ab}(\omega) = \int dE \rho_0(E) f(E) G_{\sigma}^{ab}(E, \omega) . \quad (3.63)$$

e

$$\langle b_{j\sigma}^{\dagger} a_{i\sigma} \rangle = \sum_{i=1}^4 \int dE \rho_0(E) f[p_i(E)] A_i^{ab}(E) . \quad (3.64)$$

onde $\rho_0(E)$ é a densidade de estados da rede cúbica e $f(E)$ é a função de Fermi.

3.3.2 Fase Antiferromagnética

Utilizando as equações de renormalização do campo médio (3.46 – 3.49) temos que considerar no desacoplamento BL duas sub redes com magnetizações opostas e idênticas podemos utilizar a renormalização eliminando uma das subredes, as equações similar as equações 3.46 - 3.49, com

$$\varepsilon(\mathbf{q}) \longrightarrow \varepsilon^{*\sigma}(\mathbf{q}, \omega) = \{[\varepsilon(\mathbf{q})]^2 - 6t^2\}g_{dd}^{\bar{\sigma}}(\omega) \quad (3.65)$$

$$g_{dd}^{\sigma}(\omega) \longrightarrow g_{dd}^{*\sigma}(\omega) = \frac{g_{dd}^{\sigma}}{\Delta_0(\omega)}, \quad (3.66)$$

$$g_{fd}^{\sigma}(\omega) \longrightarrow g_{fd}^{*\sigma}(\omega) = \frac{g_{fd}^{\sigma}}{\Delta_0(\omega)}, \quad (3.67)$$

$$g_{ff}^{\sigma}(\omega) \longrightarrow g_{ff}^{*\sigma}(\omega) = g_{ff}^{\sigma} + \frac{g_{ff}^{\sigma} - 6t^2g_{dd}^{\sigma}g_{dd}^{\bar{\sigma}}[(g_{fd}^{\sigma})^2 - g_{dd}^{\sigma}g_{ff}^{\sigma}]}{\Delta_0(\omega)}, \quad (3.68)$$

onde

$$\Delta_0(\omega) = 1 - 6t^2g_{dd}^{\bar{\sigma}}g_{dd}^{\sigma}. \quad (3.69)$$

a transformada de Fourier, para a equação,

$$G_{\sigma}^{dd}(\mathbf{q}, \omega) = \frac{Q_7^{\sigma}(\omega)}{P_8(\mathbf{q}, \omega)}, \quad (3.70)$$

$$G_{\sigma}^{fd}(\mathbf{q}, \omega) = -V \frac{Q_6^{\sigma}(\omega)}{P_8(\mathbf{q}, \omega)}, \quad (3.71)$$

$$G_{\sigma}^{ff}(\mathbf{q}, \omega) = \frac{P_7^{\sigma}(\mathbf{q}, \omega)}{P_8(\mathbf{q}, \omega)}, \quad (3.72)$$

onde,

$$Q_6^{\sigma}(\omega) = Q_2^{\sigma}(\omega)Q_4(\omega), \quad (3.73)$$

$$Q_7^{\sigma}(\omega) = Q_3^{\sigma}(\omega)Q_4(\omega), \quad (3.74)$$

$$P_7^{\sigma}(\mathbf{q}, \omega) = [\omega Q_4(\omega) - \varepsilon^2(\mathbf{q})Q_3^{\bar{\sigma}}(\omega)]Q_2^{\sigma}(\omega), \quad (3.75)$$

$$P_8(\mathbf{q}, \omega) = Q_4^2(\omega) - \varepsilon^2(\mathbf{q})Q_3^{\bar{\sigma}}(\omega)Q_3^{\sigma}(\omega). \quad (3.76)$$

As equações 3.70-3.72 podem ser escritas da seguinte forma,

$$G_{\sigma}^{ab}(E, \omega) = \sum_{i=1}^8 \frac{A_i'^{ab}(E)}{\omega - p_i'(E)}. \quad (3.77)$$

As equações de movimento utilizadas nessa aproximação são representadas nos cálculos abaixo, podemos analisar apenas a equação (3.81) e (3.85). Essa equação contém toda a informação do desacoplamento pois se analisarmos a equação (3.60) e (3.64) fazendo a média vimos que se trata de uma função com mais de dois operadores, separando essa função vimos que estamos tratando de um mesmo sítio então podemos desperezar esse último termo.

$$\omega \ll d_{i\sigma}; d_{j\sigma}^\dagger \gg = \delta_{ij} - V \ll f_{i\sigma}; d_{j\sigma}^\dagger \gg - \sum_k t_{ik} \ll d_{k\sigma}; d_{j\sigma}^\dagger \gg \quad (3.78)$$

$$(\omega - E_F) \ll f_{i\sigma}; d_{j\sigma}^\dagger \gg = -V \ll d_{i\sigma}; d_{j\sigma}^\dagger \gg + U \ll n_{i\bar{\sigma}}^f f_{i\sigma}; d_{j\sigma}^\dagger \gg \quad (3.79)$$

$$\begin{aligned} (\omega - E_F - U) \ll n_{i\bar{\sigma}}^f f_{i\sigma}; d_{j\sigma}^\dagger \gg = -V \ll n_{i\bar{\sigma}}^f d_{i\sigma}; d_{j\sigma}^\dagger \gg \\ + V \ll (d_{i\bar{\sigma}}^\dagger f_{i\bar{\sigma}} - f_{i\bar{\sigma}}^\dagger d_{i\bar{\sigma}}) f_{i\sigma}; d_{j\sigma}^\dagger \gg \end{aligned} \quad (3.80)$$

$$\begin{aligned} \omega \ll n_{i\bar{\sigma}}^f d_{i\sigma}; d_{j\sigma}^\dagger \gg = \delta_{ij} < n_{i\bar{\sigma}}^f > - \sum_k t_{ik} \ll n_{i\bar{\sigma}}^f d_{k\sigma}; d_{j\sigma}^\dagger \gg \\ - V \ll n_{i\bar{\sigma}}^f f_{i\sigma}; d_{j\sigma}^\dagger \gg + V \ll (d_{i\bar{\sigma}}^\dagger f_{i\bar{\sigma}} - f_{i\bar{\sigma}}^\dagger d_{i\bar{\sigma}}) d_{i\sigma}; d_{j\sigma}^\dagger \gg \end{aligned} \quad (3.81)$$

$$(\omega - E_F) \ll f_{i\sigma}; f_{j\sigma}^\dagger \gg = \delta_{ij} - V \ll d_{i\sigma}; f_{j\sigma}^\dagger \gg + U \ll n_{i\bar{\sigma}}^f f_{i\sigma}; f_{j\sigma}^\dagger \gg \quad (3.82)$$

$$\omega \ll d_{i\sigma}; f_{j\sigma}^\dagger \gg = -V \ll f_{i\sigma}; f_{j\sigma}^\dagger \gg - \sum_k t_{ik} \ll d_{k\sigma}; f_{j\sigma}^\dagger \gg \quad (3.83)$$

$$\begin{aligned} (\omega - E_F - U) \ll n_{i\bar{\sigma}}^f f_{i\sigma}; f_{j\sigma}^\dagger \gg = \delta_{ij} < n_{i\bar{\sigma}}^f > -V \ll n_{i\bar{\sigma}}^f d_{i\sigma}; f_{j\sigma}^\dagger \gg \\ + V \ll (d_{i\bar{\sigma}}^\dagger f_{i\bar{\sigma}} - f_{i\bar{\sigma}}^\dagger d_{i\bar{\sigma}}) d_{i\sigma}; f_{j\sigma}^\dagger \gg \end{aligned} \quad (3.84)$$

$$\begin{aligned} \omega \ll n_{i\bar{\sigma}}^f d_{i\sigma}; f_{j\sigma}^\dagger \gg = - \sum_k t_{ik} \ll n_{i\bar{\sigma}}^f d_{k\sigma}; f_{j\sigma}^\dagger \gg - V \ll n_{i\bar{\sigma}}^f f_{i\sigma}; f_{j\sigma}^\dagger \gg \\ + V \ll (d_{i\bar{\sigma}}^\dagger f_{i\bar{\sigma}} - f_{i\bar{\sigma}}^\dagger d_{i\bar{\sigma}}) d_{i\sigma}; f_{j\sigma}^\dagger \gg \end{aligned} \quad (3.85)$$

A aproximação BL consiste em:

- (i) Desprezar o último termo das equações (3.81) e (3.85).
- (ii) Utilizando $\ll n_{i\bar{\sigma}}^f d_{k\sigma}; d_{j\sigma}^\dagger \gg \approx \langle n_{i\bar{\sigma}}^f \rangle \ll d_{k\sigma}; d_{j\sigma}^\dagger \gg$ no segundo termo do lado direito das equações (3.81) e (3.85).

Consequentemente, as funções de Green são dadas por expansões atômicas,

$$G_{ij\sigma}^{dd} = \delta_{ij} g_{dd}^\sigma - g_{dd}^\sigma \sum_k t_{ik} G_{kj\sigma}^{dd}, \quad (3.86)$$

$$G_{ij\sigma}^{fd} = \delta_{ij} g_{fd}^\sigma - g_{fd}^\sigma \sum_k t_{ik} G_{kj\sigma}^{dd}, \quad (3.87)$$

$$G_{ij\sigma}^{ff} = \delta_{ij} g_{ff}^\sigma - g_{ff}^\sigma \sum_k t_{ik} G_{kj\sigma}^{dd}, \quad (3.88)$$

As funções de Green locais são dadas por,

$$g_{dd}^\sigma(\omega) = \frac{Q_3^\sigma(\omega)}{Q_4(\omega)}, \quad (3.89)$$

$$g_{df}^\sigma(\omega) = -V \frac{Q_2^\sigma(\omega)}{Q_4(\omega)}, \quad (3.90)$$

$$g_{ff}^\sigma(\omega) = \omega \frac{Q_2^\sigma(\omega)}{Q_4(\omega)}, \quad (3.91)$$

onde,

$$Q_4(\omega) = [\omega(\omega - E_f) - V^2] [\omega(\omega - E_f - U) - V^2], \quad (3.92)$$

$$Q_3^\sigma(\omega) = \omega(\omega - E_f)(\omega - E_f - U) - V^2(\omega - E_f - U \langle n_{i\bar{\sigma}}^f \rangle) \quad (3.93)$$

$$Q_2^\sigma(\omega) = \omega(\omega - E_f - U + U \langle n_{i\bar{\sigma}}^f \rangle) - V^2 \quad (3.94)$$

O cálculo da energia na aproximação BL consiste em reescrever as equações de movimento em relação aos comutadores e o Hamiltoniano do modelo como, $d_{i\sigma}^\dagger[d_{i\sigma}, \mathcal{H}]$ e $f_{i\sigma}^\dagger[f_{i\sigma}, \mathcal{H}]$, então,

$$d_{i\sigma}^\dagger[d_{i\sigma}, \mathcal{H}] = -V d_i^\dagger f_{i\sigma} - \sum_{<j>} t d_{i\sigma}^\dagger d_{i\sigma} \quad (3.95)$$

$$f_{i\sigma}^\dagger[f_{i\sigma}, \mathcal{H}] = E_f f_{i\sigma}^\dagger f_{i\sigma} - V f_{i\sigma}^\dagger d_{i\sigma} + U n_{i\bar{\sigma}}^f n_{i\sigma}^f \quad (3.96)$$

onde,

$$\sum_{i\sigma} d_{i\sigma}^\dagger[d_{i\sigma}, \mathcal{H}] + f_{i\sigma}^\dagger f_{i\sigma}, \mathcal{H} \quad (3.97)$$

Escrevendo de uma forma genérica os comutadores temos,

$$< a_{i\sigma}^\dagger[a_{i\sigma}, \mathcal{H}] = \frac{1}{\beta} \sum_n (i\omega_n G_{ii}^{aa}(i\omega_n) - 1) e^{i\omega_n \eta} \quad (3.98)$$

Considerando, $\int dx \rho_0(x) = 1$, onde $\sum_i A_i^{aa} = 1$, escrevendo a equação da energia como,

$$E = \frac{1}{N} < \mathcal{H} > \quad (3.99)$$

onde podemos escrever a enrgias em termos do pólos do polinômio $p(i)$,

$$\Gamma_{ii}^{aa}(\omega) = \omega G(\omega) - 1 \quad (3.100)$$

$$\Gamma_{ii}^{aa}(\omega) = \int dx \rho_0(x) [\omega \sum_i \frac{A_i^{aa}(x)}{\omega - p_i(x)} - 1] \quad (3.101)$$

$$\Gamma_{ii}^{aa}(\omega) = \int dx \rho_0(x) [\omega \sum_i A_i^{aa}(x) [\frac{\omega}{\omega - p_i(x)} - 1]] \quad (3.102)$$

onde escrevemos a relação final da energia como,

$$\Gamma_{ii}^{aa}(\omega) = \sum_i \int dx A_i^{aa}(x) p_i(x) \rho_0(x) \frac{1}{\omega - p_i(x)} \quad (3.103)$$

4 Resultados Obtidos

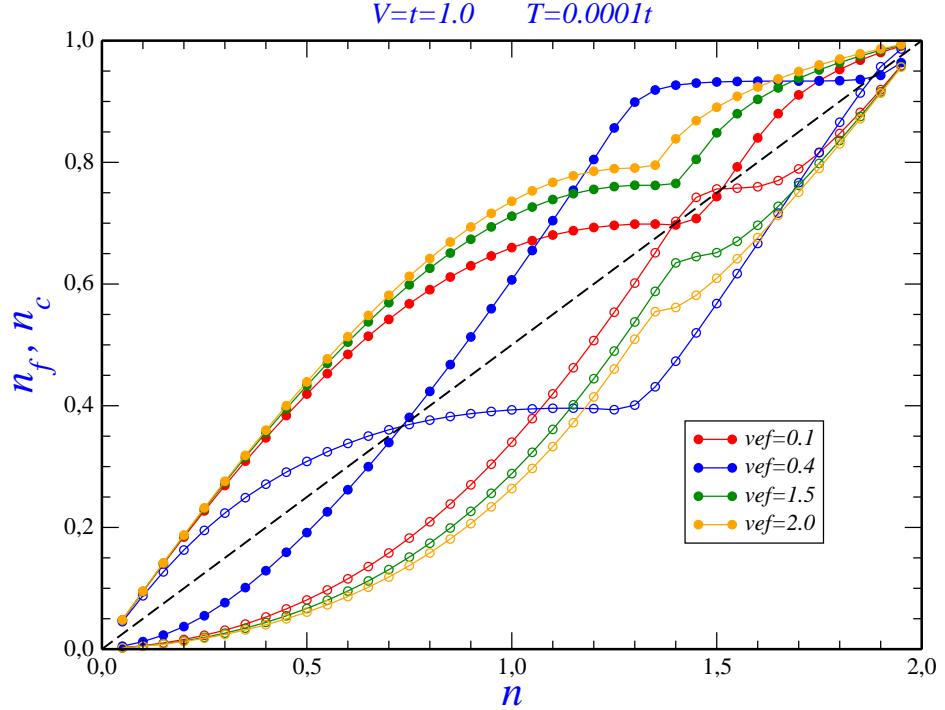
Os resultados obtidos serão apresentados em duas seções, distinguindo as duas aproximações utilizadas no trabalho.

4.1 Aproximação Campo Médio

Neste capítulo, faremos uma análise detalhada dos resultados obtidos pela aproximação do campo médio para as fases FM e AF, analisando assim as curvas de magnetização, energia e o diagrama.

Neste trabalho, trabalharemos com o m_f e o m_c .

O gráfico 4.1, mostra uma solução na fase PM, já envolvendo o cálculo auto consistente para cada valor fixo de n_t . Descrevendo a transferência de cargas entre os orbitais de condução e o orbital f, como eles se distribuem, onde n_c são os elétrons de condução e o n_f são os elétrons do orbital f.

Figure 4.1 – Curvas do n_f, n_c versus n_t na fase PM.

O gráfico 4.2, mostra as curvas da magnetização versus (V/E_f) para a fase FM , fixando a repulsão coulombiana no caso simétrico então $U = -2E_f$. A temperatura em $T = 0.0001t$, com $n_t = 1.9$ existindo uma solução FM próxima da banda semipreenchida ($n_t = 2.0$) imaginando que a fase FM predominaria nessa região. O aparecimento de uma fase intermediária FM* bem definida caracterizada por um platô de magnetização está relacionada com o ferromagnetismo fraco, experimentalmente à alguns compostos. No início da região do platô para $(V/E_f) > 1$, existem duas soluções ferromagnéticas, FM e FM*, sendo que FM* tem a energia mais baixa.

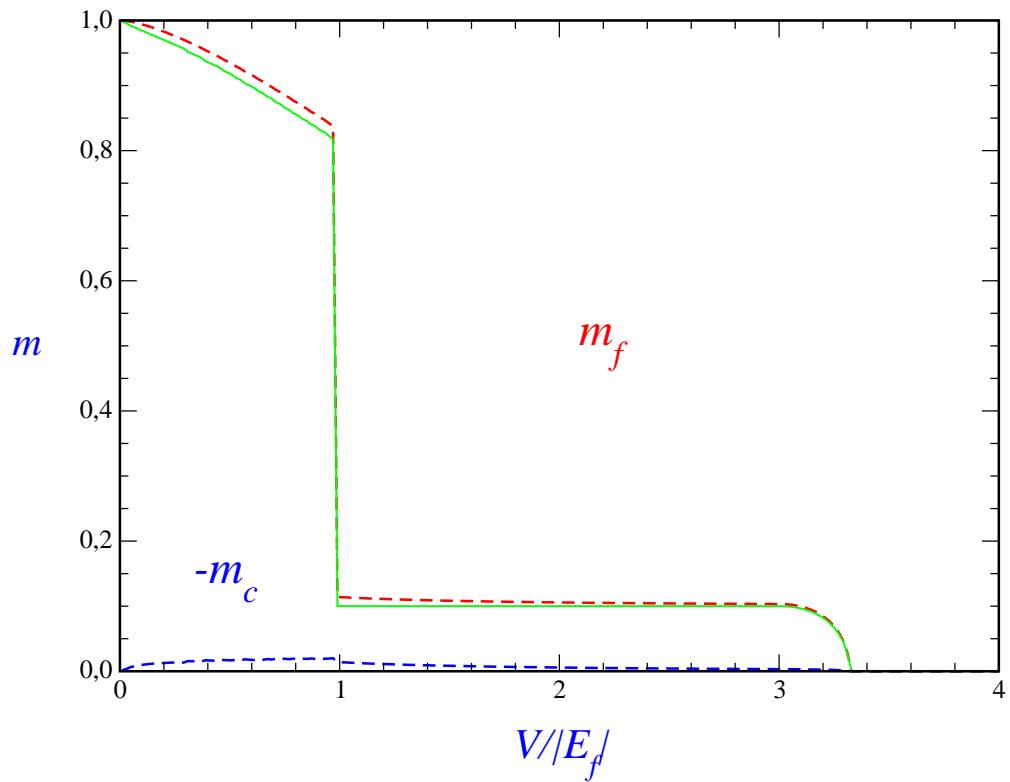


Figure 4.2 – Curva de magnetização versus $\frac{V}{|E_f|}$ na fase FM para $n_t = 1.9$.

No gráfico 4.3, mostra as curvas da magnetizações versus (V/E_f) para a fase AF , fixando a repulsão coulombiana no caso simétrico então $U = -2E_f$. A temperatura em $T = 0.0001t$, com $n_t = 1.9$, a fase AF também se desdobra em duas soluções na região, aparecendo como na fase AF, uma fase intermediária. Novamente, a energia da fase intermediária é mais baixa.

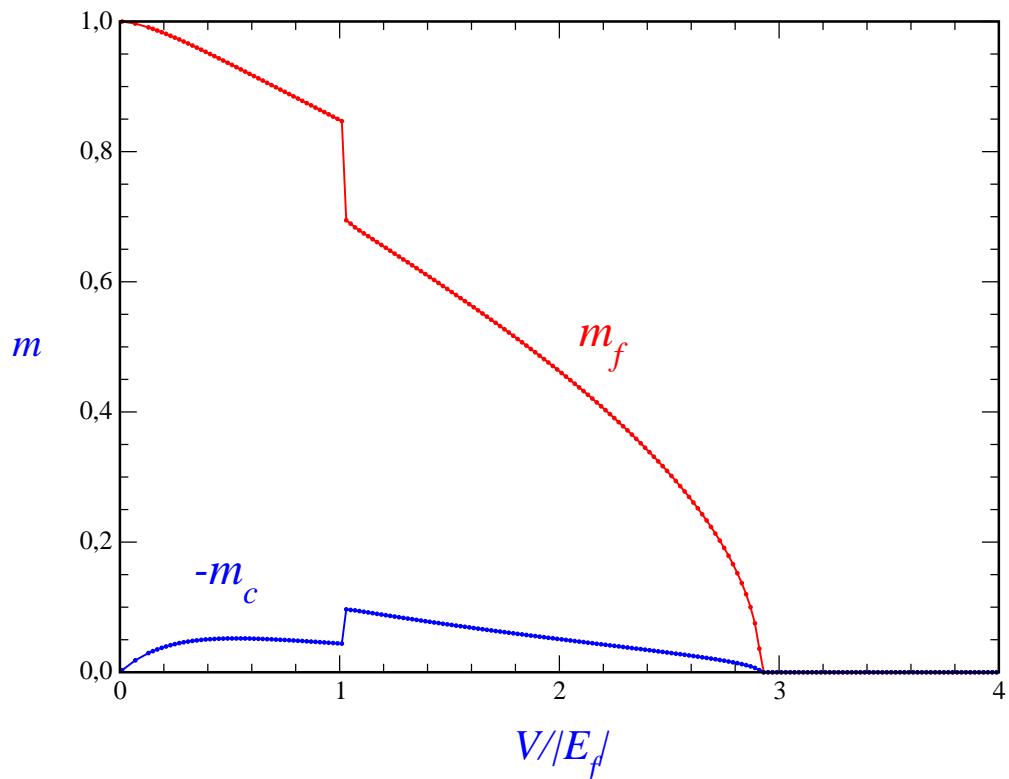


Figure 4.3 – Curva de magnetização versus $\frac{V}{E_f}$ na fase AF para $n_t = 1.9$.

O gráfico 4.4, mostra as curvas da magnetizações versus (V/E_f) para a fase AF, fixando a repulsão coulombiana no caso simétrico então, $U = -2E_f$. Vemos que na solução FM, a região da fase intermediária o platô diminuiu. Na fase AF, a solução magnética já decai para zero, não havendo mais a fase intermediária. Aparecem algumas oscilações numéricas que podem ser entendidas pela análise das curvas da energia.

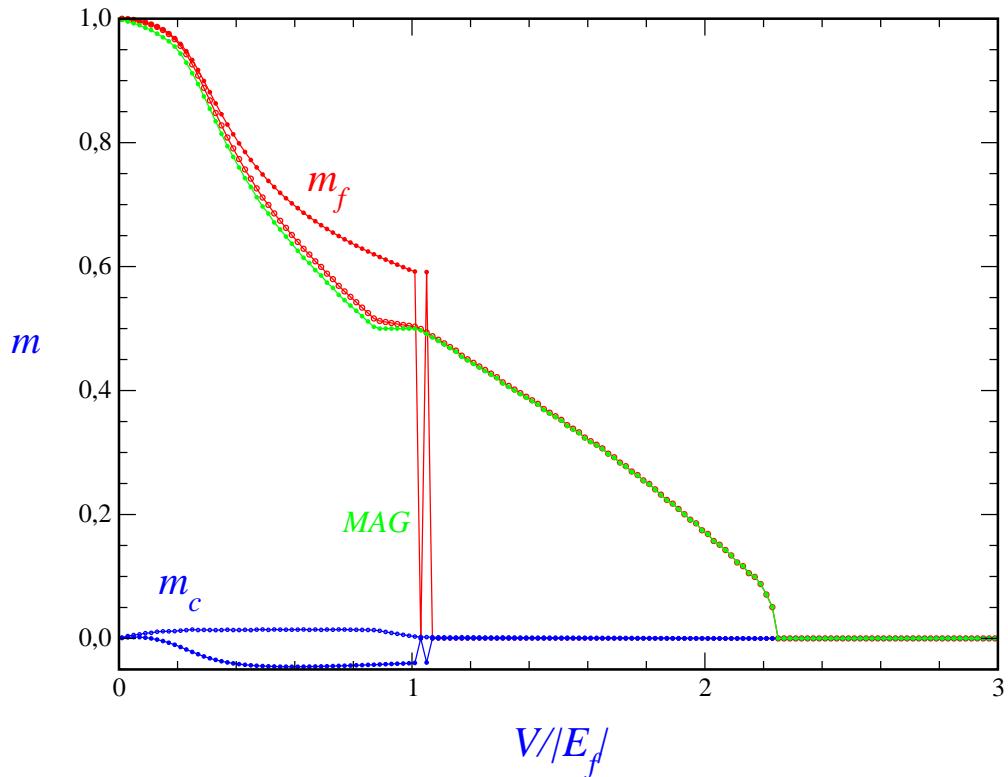


Figure 4.4 – Curvas de magnetização versus $\frac{V}{E_f}$ nas fases FM e AF para $n_t = 1.5$.

O gráfico 4.5, mostra as curvas da magnetizações versus (V/E_f) para a fase FM e AF, fixando a repulsão coulombiana no caso simétrico então $U = -2E_f$. Vimos que para valores menores de n_t existem as soluções para ambas as fases FM e AF.

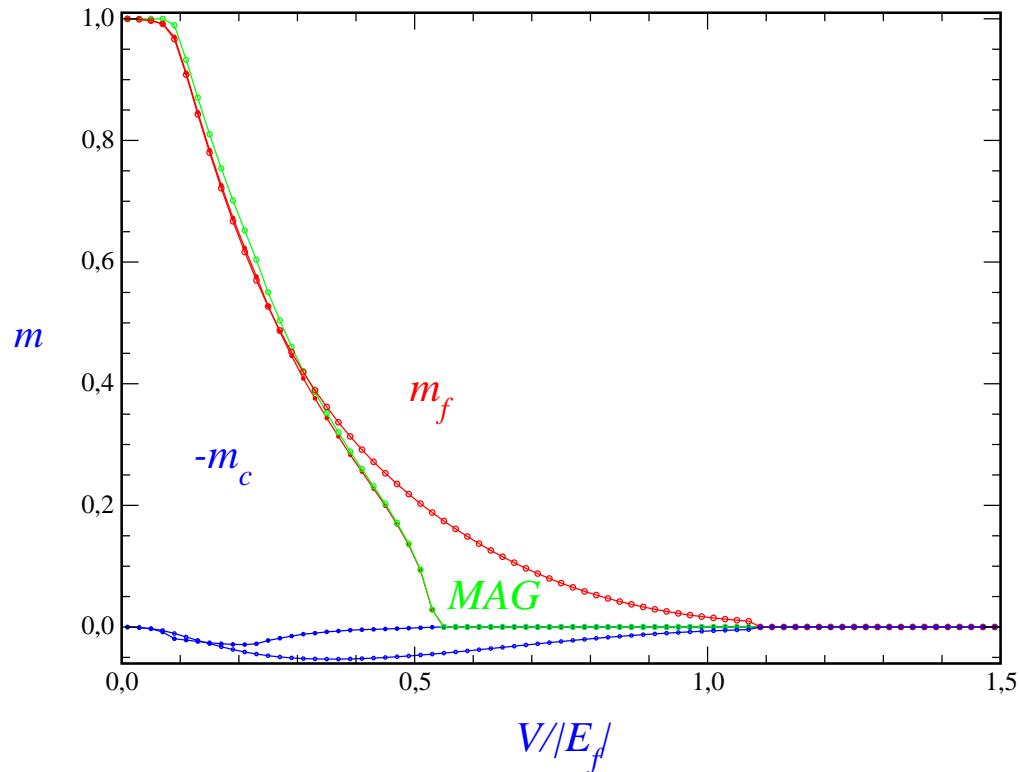


Figure 4.5 – Curvas de magnetização versus $\frac{V}{E_f}$ nas fases FM e AF para $n_t = 1.0$.

A figura 4.6, mostra o diagrama final da aproximação do Campo Médio, esse diagrama representa a existência das fases AF, FM e K. Estão sobrepostas as curvas das fases AF e FM, no interior da fase FM temos a representação da fase intermediária o platô FM*. O FM* é a soma da fase kondo com a fase FM. O diagrama foi definido através das curvas da energia, existindo uma fase AF mas certamente vai sobrar uma região de estabilidade da fase FM.

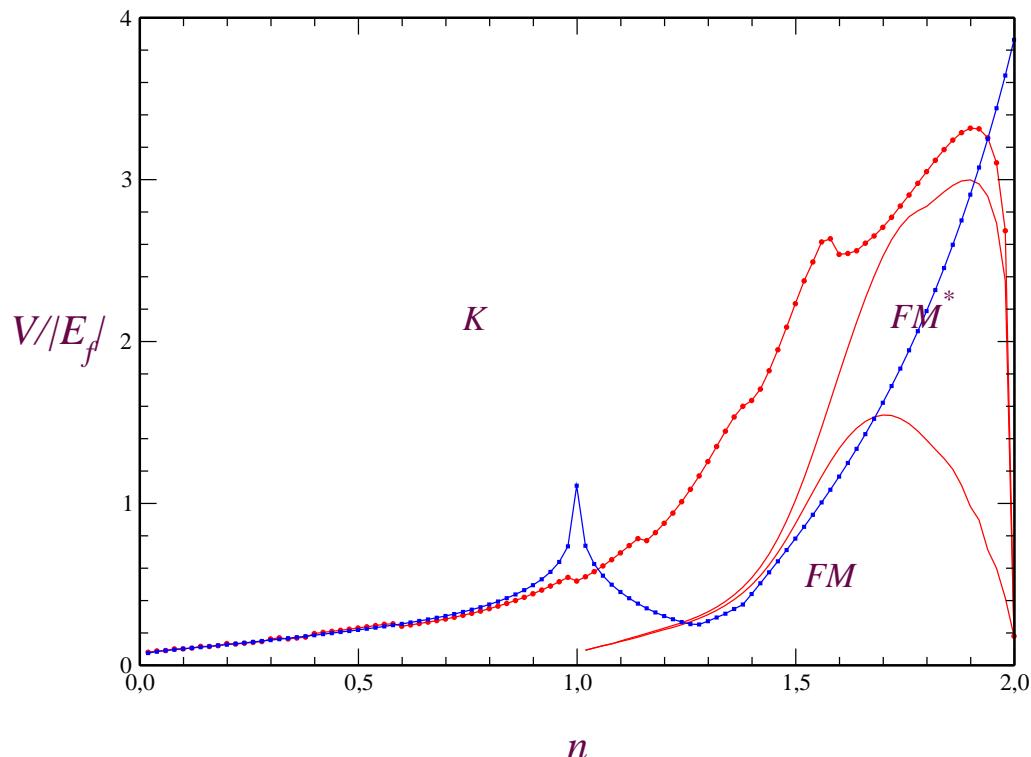


Figure 4.6 – Diagrama final com as competições das fases FM, AF e K, com $V/t = 0.5$ e $U = 2|E_f|$.

O gráfico 4.7, mostra a diferença das energias das fases FM, AF e PM versus (V/E_f) , definir o diagrama final pelas curvas de energia é complicado pois é preciso ter uma precisão melhor.

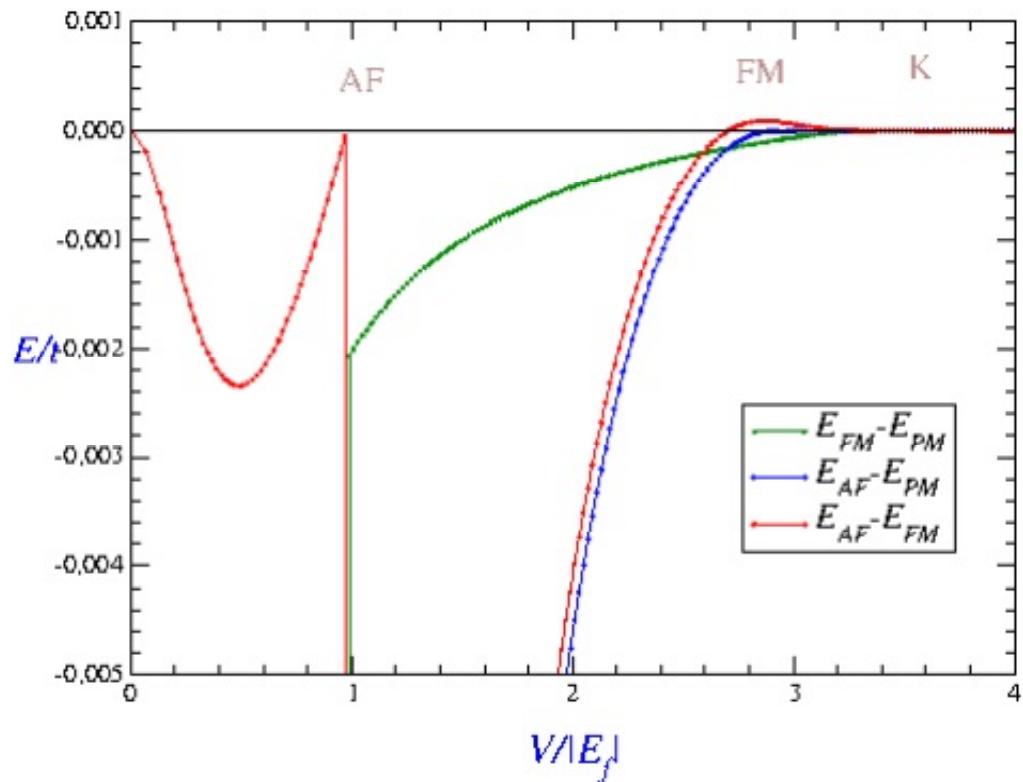


Figure 4.7 – Comparaçāo das energias da fase FM, AF e PM.

4.2 Aproximação BL

Os resultados abaixo mostram o diagrama final para o modelo de Anderson utilizando à aproximação BL, tomamos esses dois valores de n_t porque não tem existência de fase FM e AF para valores menores.

No gráfico 4.8, mostra as curvas da magnetizações versus (V/E_f) para a fase FM, a existência da fase intermediária o ferromagnetismo fraco FM*, sendo não tão perfeito como na aproximação do campo médio.

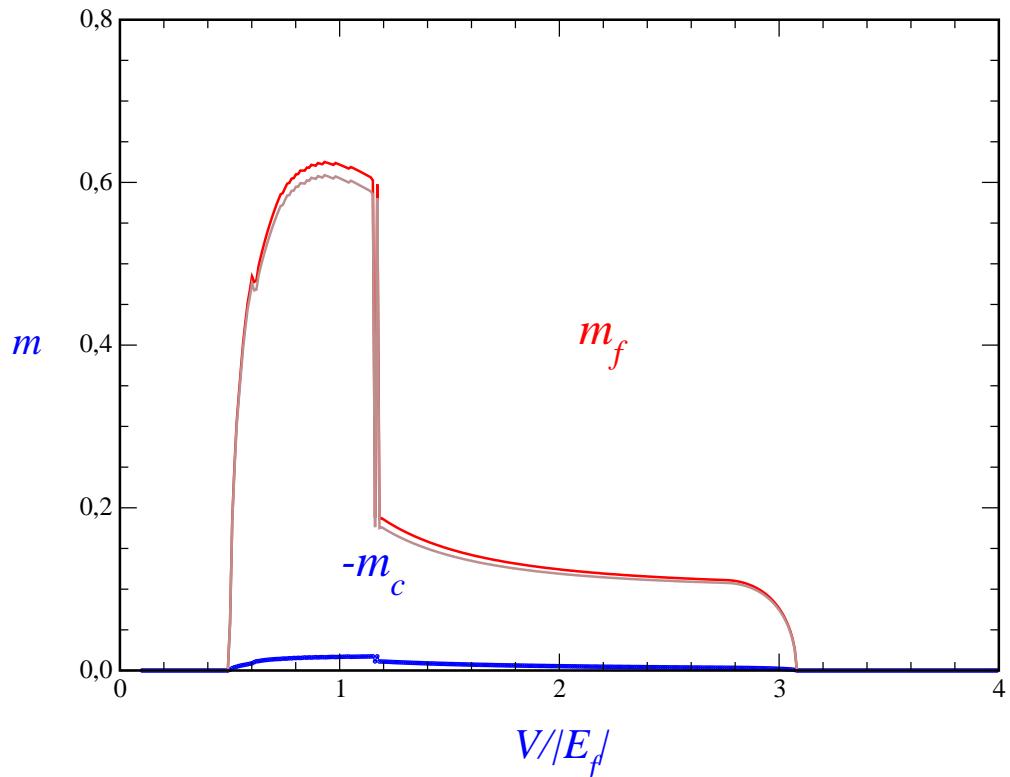


Figure 4.8 – Curva do n_f, n_c versus $\frac{V}{E_f}$, na fase FM para $n_t = 1.9$.

No gráfico 4.9, mostra as curvas da magnetizações versus (V/E_f) , há o aparecimento da curva de magnetização para fase AF a partir de um certo valor de V/E_f .

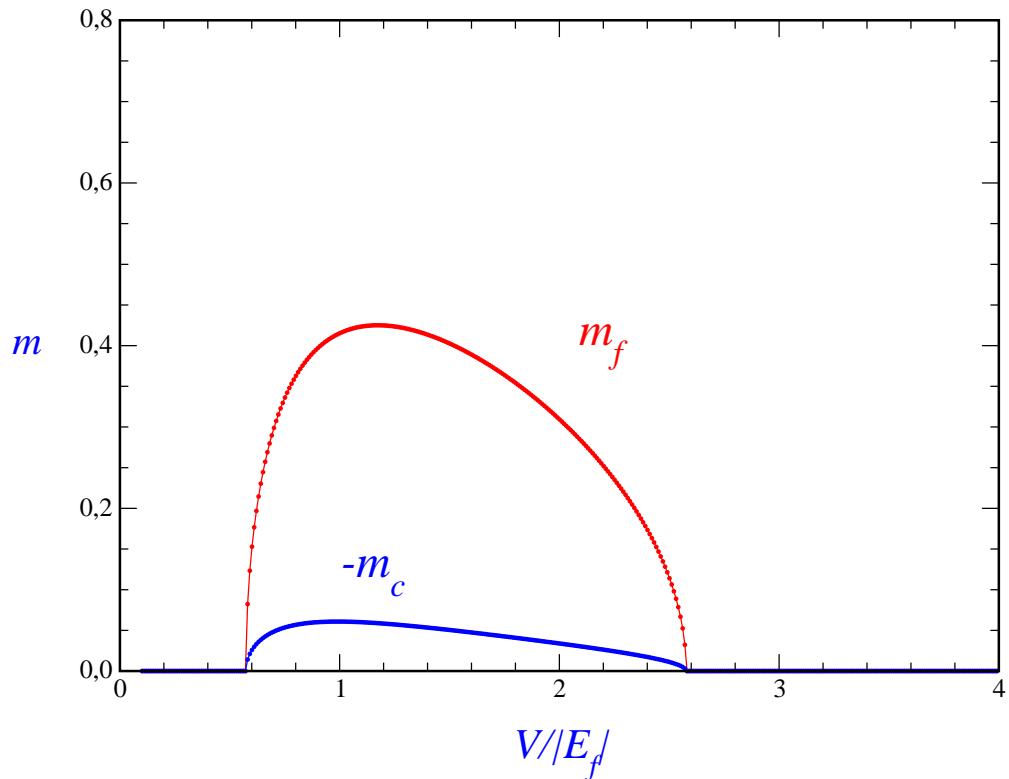


Figure 4.9 – Curva de magnetização versus $\frac{V}{E_f}$ na fase AF para $n_t = 1.9$.

A figura 4.10, mostra a curva de magnetização versus $\frac{V}{E_f}$, vemos que para as fases AF e FM não há o aparecimento de curvas isso mostra que na aproximação BL para valores menores que $n_t = 1.8$, não há fase AF.

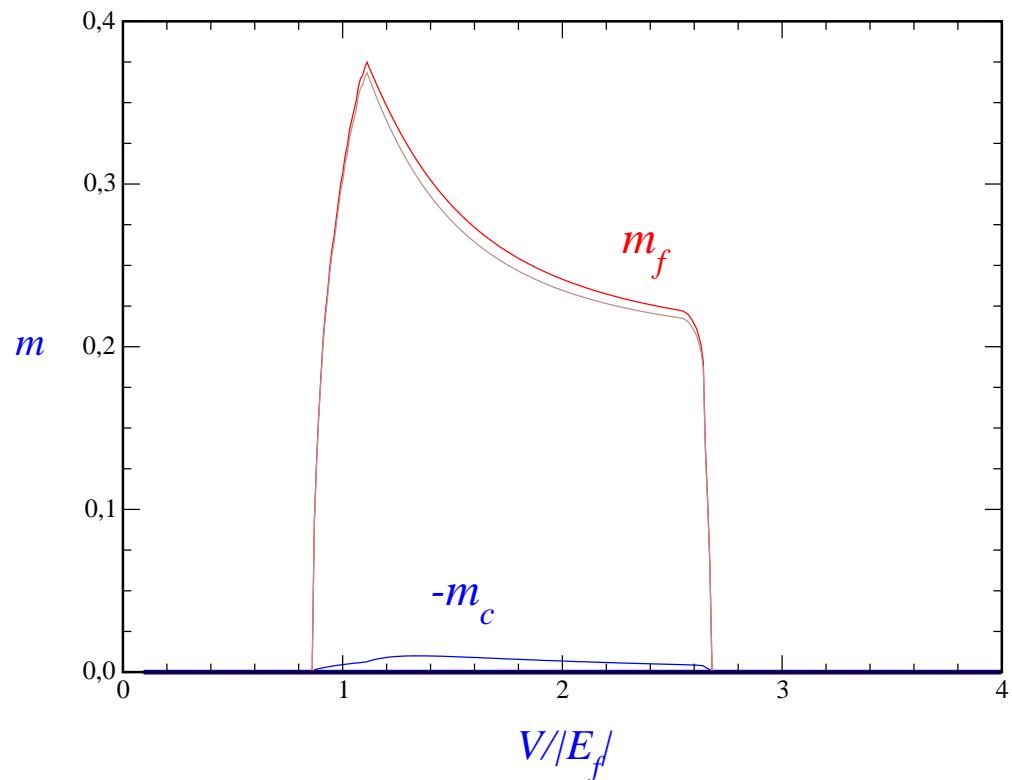


Figure 4.10 – Curvas de magnetização versus $\frac{V}{E_f}$ nas fases FM e AF para $n_t = 1.8$.

A figura 4.11 mostra o diagrama de fases do modelo de Anderson periódico na aproximação BL. Vemos que a fase AF predomina numa região estreita em torno do caso de banda semi preenchida ($n = 2$). A solução FM está presente em torno desta região. Numa primeira aproximação, podemos supor que a fase AF é mais estável que a fase FM (quando ambas estiverem presentes), e que a fase FM, por sua vez, será mais estável do que a fase K na região em que ela ultrapassa a fase AF. As regiões magnéticas exibem uma reentrância para valores pequenos de $V/|E_f|$, o que reflete a reentrância nas curvas de magnetização.

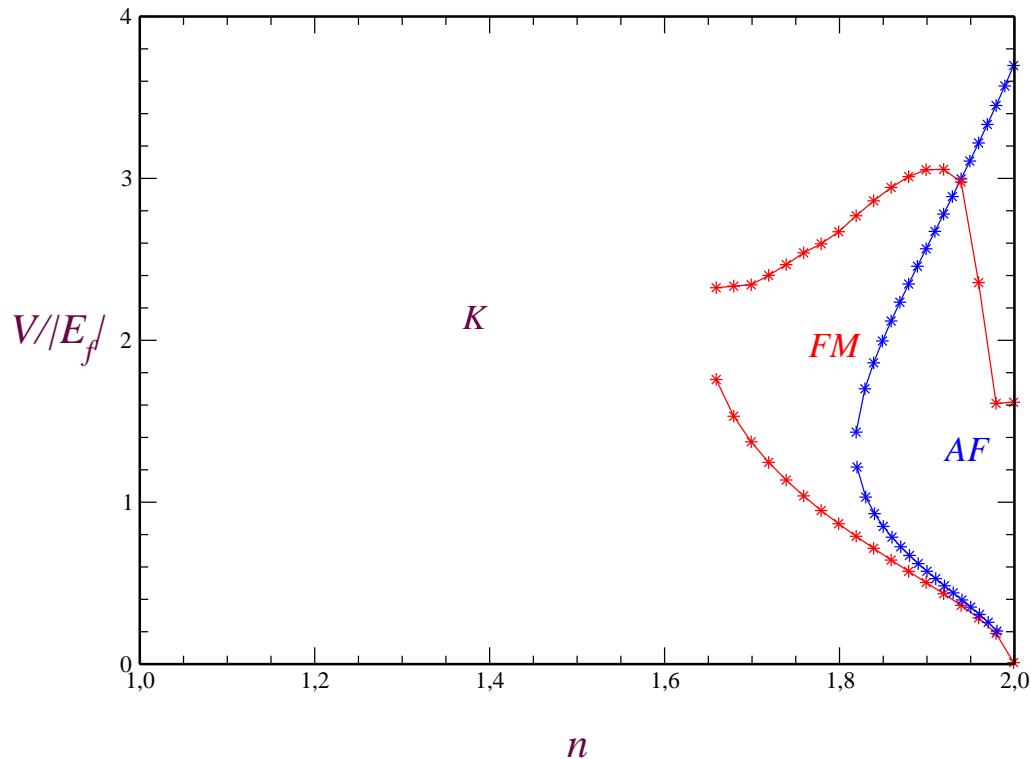


Figure 4.11 – Diagrama final com a competições das fases FM, AF e K, com $V/t = 0.5$ e $U = 2|E_f|$.

A figura 4.12 mostra o diagrama de fases do modelo de Anderson periódico na aproximação BL para $U = 4|E_f|$. Vemos que, aumentando o valor da repulsão coulombiana U , a extensão da região magnética duplica em relação ao caso da figura anterior. Portanto, podemos afirmar que, globalmente, a repulsão coulombiana favorece a ordem magnética.

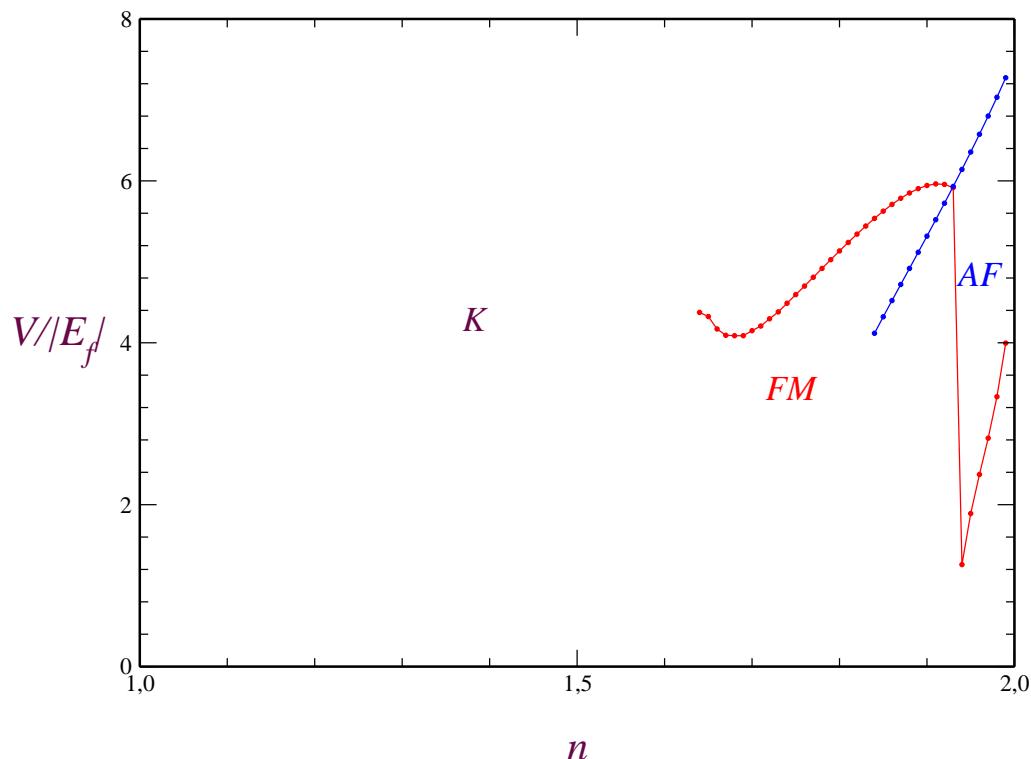


Figure 4.12 – Diagrama final com a competições das fases FM, AF e K, com $V/t = 0.5$ e $U = 4|E_f|$.

A figura 4.13 mostra as diferenças entre as energias das fases magnéticas FM e AF em relação à fase não-magnética (K ou PM), seguindo a mesma análise da fig. 4.7. Para valores suficientemente grandes de $V/|E_f|$, a fase K torna-se mais estável. O mesmo acontece para valores pequenos de $V/|E_f|$, devido à reentrância nas curvas de magnetização. As oscilações das curvas indicam a existência de uma fase AF entre estas duas regiões K rodeada por regiões FM. A análise da estabilidade é mais delicada do que no caso da aproximação MF, pois as diferenças de energia entre uma fase e outra afetam a quarta casa decimal, ficando próximas do erro numérico dos resultados.

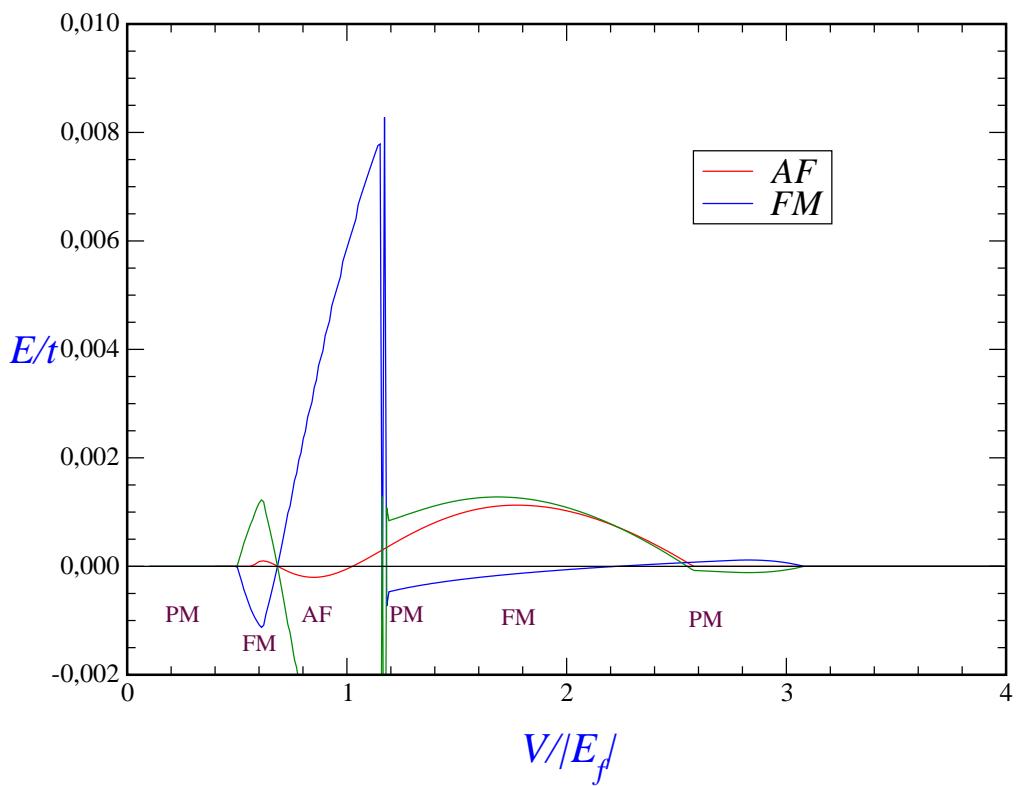


Figure 4.13 – Comparaçāo das energias da fase FM e AF, com $n_t = 1.90$.

5 Conclusão

Neste trabalho, estudamos o modelo de Anderson Periódico através do método das equações do movimento das Funções de Green onde são adotadas duas aproximações: campo médio (MF) e desacoplamento BL.

Calculamos grandezas como a magnetização e a energia.

Na aproximação MF, investigando as curvas de magnetizações determinando n_f e n_c de maneira auto consistente, m_f e m_c versus V/E_f . Vimos o aparecimento dos platôs de magnetização para certos valores de n_t . A região intermediária caracterizada pela coexistência da fase FM com o efeito Kondo com valores reduzidos da magnetização que corresponde ao FM fraco.

A fase AF também se desdobra em duas soluções, aparecendo uma região intermediária com magnetizações reduzidas, onde há uma coexistência das fases AF+K.

Na aproximação BL vemos a existência da fase intermediária mas não sendo bem caracterizada como a da aproximação MF.

Investigamos as reentrâncias, são regiões onde não há mais continuação de nenhuma fase, nas curvas de magnetização versus V/E_f para valores baixos de V. Quando V/E_f é muito pequeno não temos soluções magnéticas. É um valor mínimo de hibridização V para sustentar a ordem magnética.

Quando aumentarmos o valor da repulsão coulombiana U, observamos que a região magnética aumenta, indicando que a repulsão coulombiana favorece a ordem magnética.

O diagrama de fases pode ser entendido de maneira mais simples a partir das curvas de magnetizações, que indicam as regiões de existências das fases FM e AF.

A análise da estabilidade a partir das energias das fases indica que a AF tende a ser mais estável do que a fase FM, quando as 2 soluções existem.

Fica claro que deve existir uma região FM em torno da região AF no diagrama de fases.

Para estudos futuros podemos plotar as densidades de estados para ambas aproximações, análise da função da temperatura como proposto no diagrama de Doniach, desacoplamentos de ordem superior, para confirmar as soluções magnéticas, aprofundar a conexão com a literatura tanto teórica (outros métodos) quanto experimental (outros compostos).

Referências

- 1 P.W. Anderson, Phys. Rev. **124**, 41 (1961).
- 2 B. H. Bernhard and C. Lacroix, Phys. Rev. B **60**, 12149 (1999).
- 3 B.H. Bernhard e C. Aguiar,B. Coqblin, Physica B **378-380**, 712 (2006).
- 4 B.H. Bernhard, C. Aguiar, I. Kogoutiouk, B. Coqblin, J. Magn. Magn. Mater. 310 (2007) e76.
- 5 C.M.Varma, Y. Yafet, Phys. Rev. B 13, 2950 (1976).
- 6 J. R. Schrieffer e P.A. Wolf, Phys. Rev. **149**, 148-149 (1966).
- 7 E. Eiling, J. S. Schilling, Phys. Rev. Lett. **46**, 364 (1981).
- 8 C.M. Varma, Y. Yafet, Phys. Rev. B **13**, 2950 (1976).
- 9 C. Lacroix, Phys. Rev. **20**, 5.
- 10 J. R. Iglesias, C. Lacroix, B. Coqblin, Phys. Rev. B **56**, 55 (1997).
- 11 S.A. Shaheen, J.S. Schilling, Phys. Rev. B 35, 6880 (1987).
- 12 S. Doniach, Physica B **91**, 231 (1977).
- 13 Tsunetsugu, Sigrist, e Ueda,Rev. Mod. Phys., 69, 1997.
- 14 S. Süllow *et al.*, Phys. Rev. Lett. **82**, 2963 (1999).

- 15 B.H. Bernhard, C. Aguiar, I. Kogoutiouk e B. Coqblin, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* **310**, 76-18 (2007).
- 16 E. J. Calegari, Tese de Doutorado- Universidade Federal de Santa Maria (UFSM), Santa Maria, RS Brasil.
- 17 T. Yanagisawa e Y. Shimo, *Phys. Rev. B*, **48**, 6104 (1993).
- 18 B.H. Bernhard e B. Coqblin, *Phys. Rev. B* **404**, 3021-3024 (2009).
- 19 A. Fernandez-Paella, D. Braithwaite, B. Salce, G. Lapertot, J. Flouquet, *Phys. Rev. B* **84**, 134416 (2011).
- 20 A. Steppke et al., *Science* **339**, 933 (2013).
- 21 B. Moiler e P. WolHe, *Phys. Rev. B* **48**, 14 (1993).
- 22 B. H. Bernhard, C. Lacroix, J. R. Iglesias e B. Coqblin, *Phys. Rev. B* **61**, 441 (2000).
- 23 C. D. Batista, J. Bonca e J. E. Gubernatis, *Phys. Rev. B* **68**, 064403 (2003).
- 24 C. D. Batista, J. Bonca e J. E. Gubernatis, *Phys. Rev. B* **68**, 214430 (2003).

Apêndice A Comutadores

Para calcularmos os comutadores dos operadores fermiônicos c e c^\dagger devemos lembrar das seguintes relações:

$$\{c, c\} = 0 \quad (\text{A.1})$$

$$\{c, c^\dagger\} = 1 \quad (\text{A.2})$$

ou de uma maneira mais geral:

$$\{c_{k\sigma}, c_{k_0\sigma_0}\} = 0 \quad (\text{A.3})$$

$$\{c_{k\sigma}, c_{k_0\sigma_0}^\dagger\} = \delta_{kk_0}\delta_{\sigma\sigma_0}, \quad (\text{A.4})$$

sendo:

$$\{A, B\} = [A, B]_+ = AB + BA \quad (\text{A.5})$$

e

$$[A, B] = AB - BA, \quad (\text{A.6})$$

ou ainda:

$$[A, B] = \{A, B\} - 2BA = 2AB - \{A, B\}. \quad (\text{A.7})$$

Iremos efetuar o cálculo do comutador $[c_{i\sigma}, c_{k\alpha}^\dagger c_{m\alpha}]$ lembrando que:

$$\begin{aligned} [A, BC] &= ABC - BCA \\ &= ABC - BAC + BAC - BCA \\ &= [A, B]C + B[A, C], \end{aligned} \quad (\text{A.8})$$

e portanto:

$$[c_{i\sigma}, c_{k\alpha}^\dagger c_{m\alpha}] = [c_{i\sigma}, c_{k\alpha}^\dagger] c_{m\alpha} + c_{k\alpha}^\dagger [c_{i\sigma}, c_{m\alpha}]. \quad (\text{A.9})$$

Da relação (A.7), temos:

$$[c_{i\sigma}, c_{k\alpha}^\dagger c_{m\alpha}] = \left\{ c_{i\sigma}, c_{k\alpha}^\dagger \right\} c_{m\alpha} - 2c_{k\alpha}^\dagger c_{i\sigma} c_{m\alpha} + c_{k\alpha}^\dagger \{c_{i\sigma}, c_{m\alpha}\} - 2c_{k\alpha}^\dagger c_{m\alpha} c_{i\sigma}, \quad (\text{A.10})$$

e conforme (A.3) e (A.4), encontramos:

$$\begin{aligned} [c_{i\sigma}, c_{k\bar{\alpha}}^\dagger c_{m\alpha}] &= \delta_{ik} \delta_{\sigma\alpha} c_{m\alpha} - 2c_{k\alpha}^\dagger c_{i\sigma} c_{m\alpha} + \\ &\quad - 2c_{k\alpha}^\dagger c_{m\alpha} c_{i\sigma} \\ [c_{i\sigma}, c_{k\alpha}^\dagger c_{m\alpha}] &= \delta_{ik} \delta_{\sigma\alpha} c_{m\alpha} - 2c_{k\alpha}^\dagger \{c_{i\sigma}, c_{m\alpha}\}, \end{aligned} \quad (\text{A.11})$$

ou seja:

$$[c_{i\sigma}, c_{k\alpha}^\dagger c_{m\alpha}] = \delta_{ik} \delta_{\sigma\alpha} c_{m\alpha}. \quad (\text{A.12})$$

O procedimento para o cálculo dos demais comutadores é o mesmo, por isso deixaremos apenas o resultado dos comutadores utilizados nesta dissertação:

$$[c_{i\sigma}, c_{m\bar{\alpha}}^\dagger c_{m\alpha}] = \delta_{im} \delta_{\sigma\bar{\alpha}} c_{m\alpha}, \quad (\text{A.13})$$

$$[c_{i\sigma}, c_{m\alpha}^\dagger c_{m\alpha}] = \delta_{im} \delta_{\sigma\alpha} c_{m\alpha}. \quad (\text{A.14})$$