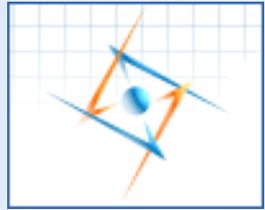


UNIVERSIDADE ESTADUAL PAULISTA



Estudo numérico de sistemas de elétrons fortemente correlacionados em baixa dimensionalidade



Faculdade
de ciências

André Luiz Malvezzi
Departamento de Física
Faculdade de Ciências
UNESP - Bauru



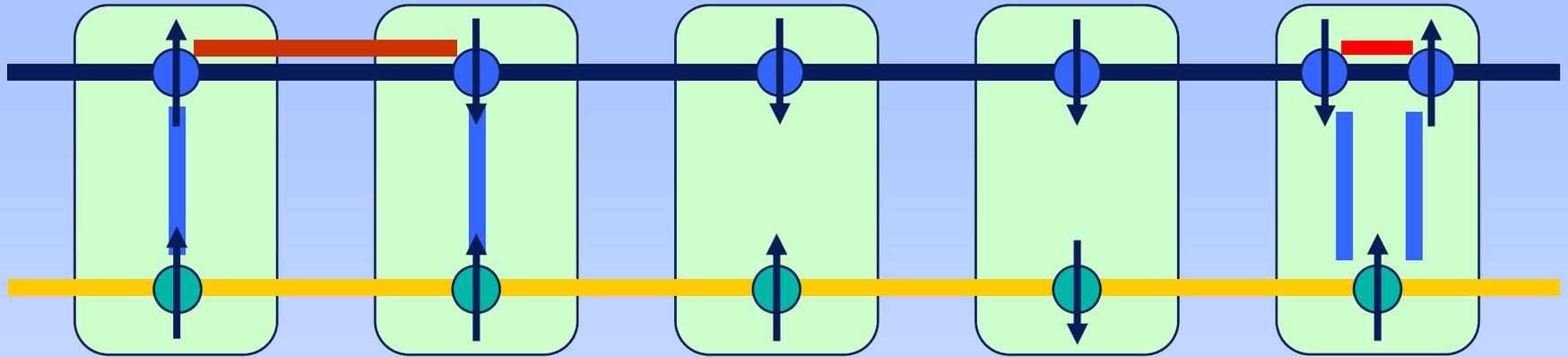
Faculdade
de ciências



Dezembro - 2007



•Exemplo: *cadeia Kondo ferromagnética* ($J_H > 0$) modela as Manganitas e a antiferromagnética ($J_H < 0$) modela sistemas de férmions pesados



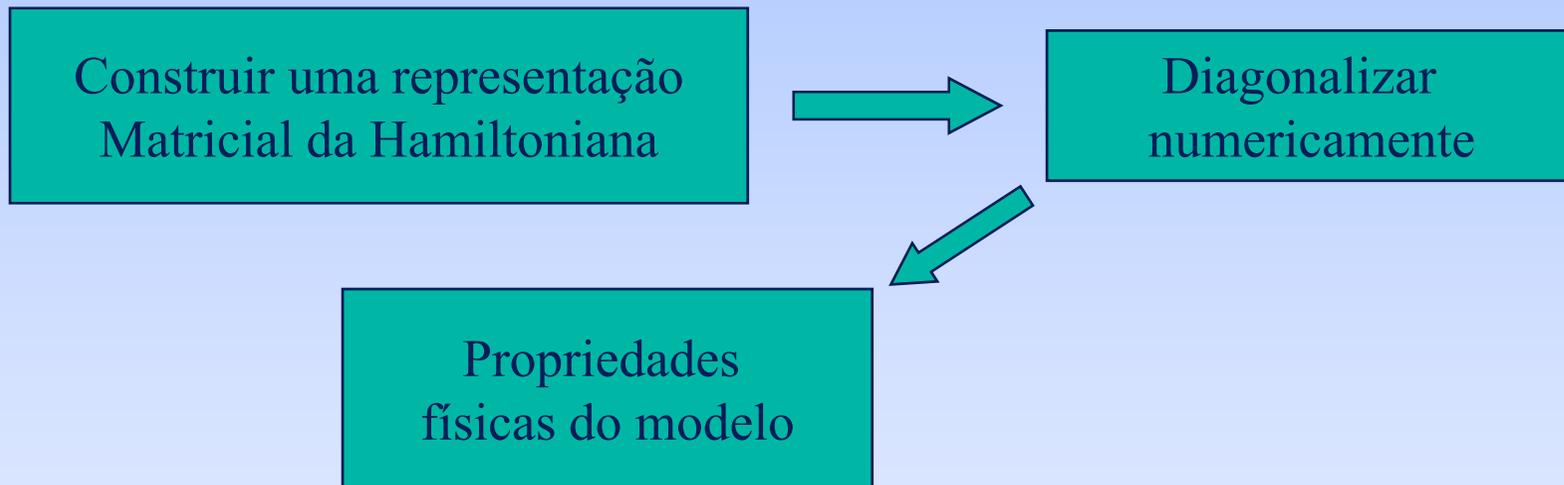
$$H = -t \sum_{i,\sigma} (c_{i,\sigma}^\dagger c_{i+1,\sigma} + h.c.) + U \sum_i n_{i,\uparrow} n_{i,\downarrow} + V \sum_i n_i n_{i+1}$$

$$-J_H \sum_i \vec{S}_i \cdot \vec{S}_i + J' \sum_i \vec{S}_i \cdot \vec{S}_{i+1}$$

$$t = 1$$

$$U, V, J_H, J' > 0$$

- Estudo numérico de sistemas finitos
 - Calcular as propriedades físicas macroscópicas
 - Estudar sistemas finitos e extrapolar resultados
 - Escolher o tamanho do sistema, o número de elétrons e os parâmetros de interação (J_H , J' , U e V) :



- 12 átomos com 10 elétrons : dimensão da matriz $e' \approx 1,5 \times 10^9$!!!
- Método de Lanczos
- Algoritmos do grupo de renormalização da matrix densidade (DMRG)

• Recursos computacionais necessários

1. Códigos de computador “caseiros” (FORTRAN) + biblioteca de manipulação de matrizes (ex: imsl).
2. Centenas de cálculos independentes, cada um executado num nó (100% de paralelização).
3. Cada cálculo consome de algumas horas a alguns dias num processador de geração recente e demanda modesta memória ($\leq 0,5$ gigabyte) e disco (≤ 10 gigabytes).