UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
INSTITUTO DE FÍSICA DE SÃO CARLOS
DEPARTAMENTO DE FÍSICA E INFORMÁTICA

CONDUÇÃO ELETRÔNICA ATRAVÉS DE UM CONTATO QUÂNTICO
PONTUAL

Vivaldo Leiria Campo Júnior

*Dissertação apresentada ao Instituto de Física
de São Carlos, Universidade de São Paulo, para
obtenção do Título de Mestre em Ciências (Física
Básica)*

ORIENTADOR: Prof. Dr. Luiz Nunes de Oliveira

SÃO CARLOS

1999

IFSC-USP SERVIÇO DE BIBLIOTECA

Campo Júnior, Vivaldo Leiria.

Condução eletrônica através de um contato quântico pontual /Vivaldo Leiria Campo Júnior.–São Carlos, 1999.

106 p.

Dissertação (Mestrado)–Instituto de Física de São Carlos, 1999.

Orientador: Prof. Dr. Luiz Nunes de Oliveira

1. Contato Quântico. 2. Modelo de Anderson. 3. Condutância eletrônica. I. Título.

IFSC**UNIVERSIDADE
DE SÃO PAULO****Instituto de Física de São Carlos**

E-mail: wladerez@if.sc.usp.br

Av. Dr. Carlos Botelho, 1465
CEP 13560-250 - São Carlo
Brasil

Fone (016) 273-9333

Fax (016) 272-2218

MEMBROS DA COMISSÃO JULGADORA DA DISSERTAÇÃO DE
MESTRADO DE VIVALDO LEIRIA CAMPO JÚNIOR APRESENTADA AO
INSTITUTO DE FÍSICA DE SÃO CARLOS, DA UNIVERSIDADE DE
SÃO PAULO, EM 30 DE ABRIL DE 1999.

COMISSÃO JULGADORA:

Prof. Dr. Luiz Nunes de Oliveira/IFSC-USP

Prof. Dr. Lidério Citrângulo Ioriatti Júnior/IFSC-USP

Prof. Dr. Nelson Studart Filho/UFSCar

30/04/9909:14

Aos meus pais

Agradecimentos

Ao Prof. Luiz Nunes de Oliveira, pela confiança depositada em mim e pela serenidade, entusiasmo e competência com que pesquisa e ensina. Foi um grande prazer ter trabalhado com ele nestes dois anos, durante os quais me apoiou e incentivou constantemente. O seu exemplo será sempre uma referência para mim.

Aos amigos do grupo, Prof. Valter Líbero, Klaus Capelle, Neemias, Luis Ramos, Nilva e, especialmente, Cíntia, João Vítor e Marcelo, companheiros valiosos, com quem convivi diariamente. Com cada um deles aprendi bastante.

Aos demais amigos do IFSC, que tornam este instituto um ambiente acolhedor e estimulante. O convívio com todos me traz grande satisfação.

Aos funcionários do IFSC.

*Este trabalho foi financiado pela **FAPESP***

Índice

Lista de Figuras	i
Resumo	viii
Abstract	ix
I Introdução	1
II Modelo	16
II.1 Simplificações para os gases eletrônicos e Hamiltoniano para o problema	16
II.2 Breve exposição do Modelo de Anderson	22
II.3 Cálculo da condutância em função da frequência no regime de resposta linear . .	25
II.4 Relação entre a condutância e a densidade espectral do nível de energia ϵ_d da ilha	28
III Nosso problema abordado pelo Grupo de Renormalização Numérico	32
III.1 Discretização logarítmica da banda de condução	33
III.2 Tridiagonalização da banda de condução	37
III.3 Diagonalização iterativa	39
III.4 A banda de condução livre da impureza e pontos fixos	44
III.4.1 Pontos fixos	48
III.5 O operador corrente e o procedimento de cálculo da condutância segundo o GRN	49
III.5.1 Elementos de matriz invariantes	53
III.5.2 Procedimento de cálculo para determinação da condutância em função da frequência	55

IV Resultados e Discussão	61
V Conclusão	72
A Troca de t_j por $t_j e^{\pm i\phi}$ e Operador Corrente Elétrica	76
B Tridiagonalização da banda de condução	80
C Operadores de Spin em segunda quantização	87
D Relações de recorrência para os elementos de matriz invariantes do operador c_0	88

Lista de Figuras

I-1	Visão esquemática do dispositivo. Acima à esquerda temos uma vista frontal, abaixo, uma vista superior e acima à direita, uma vista lateral. Neste esquema não estão desenhados os detalhes da ligação da estrutura semicondutora à uma bateria.	2
I-2	Esta figura foi extraída da Ref. 8. Ela nos mostra uma ampliação de 70.000 vezes do conjunto de eletrodos com os quais a ilha é construída.	4
I-3	Esta figura também foi extraída da Ref. 8. Ela nos mostra três diferentes gráficos da condutância em função do potencial de gate. Nos dois primeiros o acoplamento com a ilha é suficientemente forte para haver o efeito Kondo. Notemos que com o aumento da temperatura a condutância vai diminuindo. No terceiro gráfico, o acoplamento é fraco, de modo que a temperatura Kondo é menor que 90 mK. Assim temos um gráfico típico do bloqueio Coulombiano, com picos estreitos para a condutância correspondentes a valores do potencial de gate onde a os estados da ilha com diferentes números de ocupação são degenerados.	5
I-4	A parábola à esquerda representa a energia da impureza no modelo de Anderson em função do número de elétrons presentes na mesma. A segunda parábola representa a energia da ilha. Com convenientes parâmetros ϵ_d e U a parábola de Anderson pode, após uma translação, ser superposta à parábola da ilha, onde o estado com nenhum elétron torna-se equivalente ao estado com 50 elétrons na segunda, o com 1 elétron torna-se equivalente ao estado com 51 elétrons na ilha e o com 2 elétrons ao estado com 52 elétrons na ilha.	8

I-5	Representação da inversão do spin da impureza no modelo de Anderson. É necessária uma transição virtual para um estado em que o número de elétrons na impureza seja igual a 2, onde o elétron a mais provém da banda de condução. Também poderíamos ter uma transição virtual onde o número de elétrons na impureza passasse de 1 a 0, com o elétron sendo enviado à banda de condução.	12
I-6	Condutância em função da frequência no caso simétrico, $2\epsilon_d + U = 0$. Para alta frequência, há um pico que pode ser ajustado por uma curva (vermelha) correspondente ao caso $U = 0$. Para frequências baixas, a condutância aumenta significativamente devido ao efeito Kondo. Esta subida pode ser ajustada por uma curva universal (azul), cujo único parâmetro de ajuste é a temperatura Kondo.	14
I-7	Relação entre o valor da condutância DC e o número de ocupação da ilha. Quando o parâmetro ϵ_d passa a favorecer a ocupação da ilha por 1 elétron a condutância aumenta rapidamente.	15
II-1	Os gases eletrônicos, após serem considerados unidimensionais, são unidos para formar um anel, onde são tratados no esquema tight-binding, daí a presença dos sítios ao longo do anel. A ilha, sítio 0 na figura, se diferencia dos demais sítios por haver a repulsão Coulombiana na mesma e pela taxa de tunelamento entre ela e seus sítios vizinhos ser V ao invés de t . Com $V \ll t$, procuramos representar uma barreira de potencial entre os gases eletrônicos e a ilha. A força eletromotriz provém do fluxo magnético variável no tempo através do anel.	18
II-2	A variação da fase na taxa de tunelamento ao longo do anel pode ser visualizada através de uma espiral com eixo circular em que a rotação é proporcional à fase. Uma mudança de gauge é feita simplesmente arrastando as voltas da espiral de tal modo que elas fiquem concentradas em uma pequena faixa do anel. Aqui ela ficou concentrada entre os sítios vizinhos à ilha.	20
II-3	No modelo de Anderson a ilha possui 4 configurações possíveis: vazia, um elétron com spin $\uparrow$, um elétron com spin $\downarrow$ ou 2 elétrons. E ela está acoplada a uma banda de condução.	22

II-4	Alguns possíveis conjuntos de parâmetros para o Modelo de Anderson: a) caso simétrico, onde $2\epsilon_d + U = 0$. A faixa representa a largura do nível, $\Gamma = \pi\rho V^2$, e neste caso, $\Gamma \ll \epsilon_d $; b) caso em que $U < \epsilon_d $ e no estado fundamental da ilha há dois elétrons na mesma; c) caso em que $-\epsilon_d < \epsilon_d + U < 0$; d) caso em que $\Gamma \gg \epsilon_d + U $; e) caso em que $\epsilon_d, U > 0$	24
II-5	Para a equivalência entre os modelos de Kondo e Anderson é necessário considerar transições virtuais no modelo de Anderson entre estados com diferentes números de ocupação da ilha.	25
III-1	Em unidades de D, a banda de condução é subdividida em subintervalos simétricos em torno da origem. Estes intervalos, salvo aqueles no topo ou no fundo da banda de condução, são tais que seus comprimentos formam uma progressão geométrica de razão Λ^{-1} . Variando-se o parâmetro z, estes subintervalos são reposicionados no eixo das energias.	34
III-2	À medida que as iterações vão aumentando, o conjunto de possíveis subespaços (carga, spin total) vai se alternando, ora correspondendo aos quadros brancos de um tabuleiro de xadrez, ora aos quadros pretos. Para montarmos um subespaço presente na iteração N+1, um quadro preto por exemplo, partimos dos estados presentes nos quadros brancos a norte, sul, leste e oeste daquele quadro, correspondentes a subespaços presentes na iteração N.	42
III-3	Evolução dos 6 primeiros níveis de energia com o aumento das iterações. Só devem ser consideradas as iterações pares. Os patamares correspondem aos pontos fixos de elétrons livres, momento magnético localizado e impureza fortemente acoplada. Os valores no regime de impureza fortemente acoplada (N grande) são dados em termos de η_j ao invés de $\widehat{\eta_j}$ devido à defasagem de $\frac{\pi}{2}$ nos níveis de energia decorrente do acoplamento com a impureza. O valor $2\eta_1 + \eta_2$ corresponde, por exemplo, à excitação de um par partícula-buraco mais uma partícula.	47

III-4	Para energias altas, ambos os casos encontram-se no ponto fixo de ilha livre. Diminuindo a energia há o <i>crossing over</i> para outro ponto fixo quando atingimos energias da ordem de ϵ_d . No caso simétrico vamos para o ponto fixo de momento localizado e no outro vamos para o ponto fixo de valência flutuante. Seguindo com a diminuição de energia, atingimos valores da ordem de $\Gamma(0)$ e, novamente, há uma passagem para outro ponto fixo. Agora ambos se dirigem para o ponto fixo de ilha fortemente acoplada. No caso assimétrico, se $\Delta > \Gamma(0)$, antes do ponto fixo de ilha fortemente acoplada, o sistema passaria pelo ponto fixo de momento localizado e haveria efeito Kondo.	50
III-5	A partir do cálculo com diferentes valores de z , somos capazes de suavizar o espectro, obtendo uma curva contínua para a condutância em função da frequência.	55
III-6	Ilustração da energia de corte em função de z . Considerando que ela fosse proporcional a Λ^{1-z} teríamos a exponencial. Mas estas energias de corte nos forçam a considerar uma janela de corte muito estreita (faixa cinza). Para alargá-la passamos a tomar a energia de corte seguindo a exponencial até $z = 1$, e daí para frente a mantemos constante.	57
IV-1	Esta é a mesma figura apresentada na Introdução. Como nosso cálculo é feito a temperatura $T = 0$, o vale entre os picos característicos do bloqueio Coulombiano desaparece e ficamos com um patamar de alta condutância em correspondência à faixa de valores de ϵ_d onde o número de ocupação da ilha é essencialmente 1.	64
IV-2	Densidade espectral no nível de energia da ilha em função da energia (em unidades de D) no caso simétrico. A curva é simétrica em relação à origem. Os picos fora da origem correspondem às transições da ilha com 1 elétron para a ilha vazia (à esquerda) e da ilha com 1 elétron para a ilha com 2 elétrons (à direita). O pico na origem corresponde ao pico Kondo, que provém das transições virtuais entre o estado onde a ilha tem 1 elétron para os demais.	66

IV-3	Esta figura também foi apresentada na Introdução. Trata-se do gráfico da condutância em função da frequência para o caso simétrico ainda. Há um pico em alta frequência, correspondente à energia de excitação para retirar (colocar) um elétron da ilha (na ilha). Em um caso assimétrico há dois picos, pois essas energias são diferentes. Para baixa frequência, o pico Kondo da densidade espectral dá origem ao significativo aumento da condutância. A curva vermelha, que se ajusta ao resultado numérico em alta frequência, é obtida do cálculo analítico para o caso $U = 0$. A curva azul, que se ajusta ao resultado numérico em baixa frequência é obtida a partir de uma proposta de curva universal para a densidade espectral da impureza no regime Kondo.	67
IV-4	Novo gráfico da condutância em função da frequência para um caso assimétrico. Há dois picos mas o segundo pico, entre 10^{-2} e 10^{-1} não está visível neste gráfico. A sua existência é mais facilmente observada no gráfico da Fig. 5. Os parâmetros utilizados para obtenção desta curva foram tais que a ilha encontra-se com número de ocupação intermediário entre 2 e 1, por isto a condutância DC é menor que a do gráfico anterior.	69
IV-5	A ordenada neste gráfico é proporcional a $\omega G(\omega)$. É uma forma alternativa de se analisar a condutância, a qual é, inclusive, mais natural, tendo em vista nosso procedimento numérico. Aqui vemos duas subidas abruptas, que correspondem aos dois picos em alta frequência presentes no gráfico anterior. Em baixa frequência, uma vez que a condutância tende a um valor constante, $\omega G(\omega)$ vai a zero linearmente. Mas isto não está muito visível. No gráfico a seguir destacamos esta região.	70
IV-6	Gráfico $\log x \log$ de $\frac{\hbar\omega}{D} G(\omega)$ em função de $\frac{\hbar\omega}{D}$. A partir do coeficiente linear do mesmo podemos encontrar o valor da condutância DC.	71

Resumo

Neste trabalho é apresentado o cálculo, pelo grupo de renormalização numérico, da condutância AC através de uma nanoestrutura acoplada a gases eletrônicos, a baixa temperatura e no regime de resposta linear. Este sistema apresenta a competição entre dois efeitos: bloqueio Coulombiano e efeito Kondo. Nosso modelo considera gases eletrônicos unidimensionais que são unidos pelas extremidades para formar um anel, no qual a corrente é induzida por um fluxo magnético oscilante com frequência ω . Nós partimos de um modelo tight-binding de vizinhos mais próximos para os gases eletrônicos e, deste modo, o potencial vetor é facilmente incorporado ao Hamiltoniano por condições de contorno torsionais. Uma barreira de potencial entre os gases eletrônicos e a nanoestrutura é simulada em termos de uma taxa de tunelamento entre a nanoestrutura e os sítios adjacentes menor que aquela entre sítios vizinhos no anel. A capacitância da nanoestrutura é pequena, o que implica que nós podemos considerar mudanças no número de elétrons dentro da mesma por apenas uma unidade. Como consequência, o Hamiltoniano é mapeado no Hamiltoniano de Anderson com correlação U entre os elétrons. Uma voltagem de gate controla a energia da impureza (da nanoestrutura), ϵ_0 . Plotada como função de ω , a condutância mostra dois picos característicos do bloqueio Coulombiano, em frequências correspondentes às energias para adicionar um elétron à nanoestrutura e para remover um elétron da nanoestrutura respectivamente. No regime Kondo, $0 > \epsilon_0 > -U$ (ou seja, para voltagens de gate tais que a nanoestrutura isolada teria estado fundamental com degenerescência de spin), um pico (Kondo) adicional aparece próximo à $\omega = 0$. Plotada como função de V_g , a condutância DC mostra um largo pico no regime Kondo, caindo rapidamente a zero para voltagens resultando em um estado fundamental não degenerado para a nanoestrutura isolada. Uma relação entre a condutância e a densidade espectral do nível da impureza é obtida e utilizada para interpretar os resultados numéricos.

Abstract

In this work a renormalization-group calculation of the low-temperature AC conductance in the linear response regime through a nanostructure coupled to metallic leads is presented. This system shows a competition between two effects: the Coulomb blockade and the Kondo effect. Our model considers one-dimensional leads which are connected to form a ring, in which a current is induced by a magnetic flux oscillating at the frequency ω . We start from a nearest-neighbor tight-binding model for the leads and in this way the potential vector is easily incorporated in the model Hamiltonian by twisting boundary conditions. A potential barrier between the leads and the nanostructure is simulated in terms of a tunneling rate between the nanostructure and the adjacent sites in the leads, which is smaller than the one between neighbors sites in the leads. The capacity of the nanostructure is small, which implies that substantial energy changes are associated with each electron transferred to the nanostructure. As a consequence, the model Hamiltonian maps onto the spin-degenerate Anderson Hamiltonian with correlation U between the electrons. A gate voltage V_g controls the impurity (i.e., nanostructure) energy ϵ_0 . Plotted as a function of ω , the conductivity shows two Coulomb-blockade peaks, at the energies needed to add an electron to and to remove an electron from the nanostructure, respectively. In the Kondo regime $0 > \epsilon_0 > -U$ (i.e., for gate voltages such that the isolated nanostructure would have a spin-degenerate ground state), an additional (Kondo) peak appears near $\omega = 0$. Plotted as a function of V_g , the static conductivity shows a broad peak in the Kondo regime and drops rapidly to zero for voltages resulting in a non-degenerate nanostructure ground state. A relation between the conductance and the spectral density of the impurity is obtained and used to interpret the numerical results.

Capítulo I

Introdução

Nas duas últimas décadas tem havido um desenvolvimento extraordinário na tecnologia de nanofabricação, principalmente de dispositivos eletrônicos compostos de materiais semicondutores. Esta evolução pode ser exemplificada pela gradativa diminuição da dimensionalidade dos sistemas físicos fabricados, iniciando com os 3D e suas propriedades de bulk, passando aos gases de elétrons em duas dimensões (existentes ao longo da superfície de separação de dois semicondutores diferentes), até chegarmos a fios e pontos quânticos, estes últimos, podendo ser encarados como átomos artificiais.

Assim, muitos dos dispositivos fabricados podem ser classificados como sistemas mesoscópicos, isto é, sistemas cujas dimensões características são intermediárias entre dimensões macroscópicas e dimensões microscópicas (escala atômica) e que hoje constituem um ramo da Física do Estado Sólido em crescente desenvolvimento ^[1].

Estes sistemas mesoscópicos, dadas as suas dimensões reduzidas, apresentam características particulares, como por exemplo, não permitirem que se tome o limite termodinâmico na análise de suas propriedades, pois neste limite eles deixariam de ser mesoscópicos; possuem espectros de energia discretos; terem funções de onda eletrônicas coerentes ao longo dos mesmos, propiciando fenômenos de interferência (como em experimentos do tipo Aharonov-Bohm ^[11]) ou a obtenção de correntes persistentes ^[1].

Fatalmente estes sistemas estão acoplados a sistemas macroscópicos e a influência deste acoplamento sobre suas propriedades é também objeto de bastante interesse, sendo que o trabalho de mestrado descrito nesta dissertação aborda um problema desta natureza, ainda que

Figura I-1: Visão esquemática do dispositivo. Acima à esquerda temos uma vista frontal, abaixo, uma vista superior e acima à direita, uma vista lateral. Neste esquema não estão desenhados os detalhes da ligação da estrutura semicondutora à uma bateria.

bastante simplificado em dois aspectos principais:

- 1- quanto ao sistema mesoscópico em si, que é tomado como tendo uma estrutura de níveis de energia bastante simples;
- 2- quanto ao que seja o sistema macroscópico acoplado e como se dá este acoplamento.

Consideremos o dispositivo esquematizado na Fig. 1. Na interface entre os dois semicondutores surge um gás de elétrons, que, essencialmente, é bidimensional. A distribuição espacial deste gás eletrônico é controlada pelos contatos metálicos depositados sobre o semicondutor: atribuindo a eles potencial elétrico negativo, as regiões na interface abaixo dos mesmos tornam-se regiões de depleção, ou seja, ficam sem elétrons.

Pela figura, então, vemos que o gás eletrônico é dividido em dois e há uma pequena região central onde também é possível encontrarmos elétrons. Essa região central possui dimensões da ordem de 100 nm e constitui o nosso sistema mesoscópico. Daqui para frente a denominaremos por ilha.

O sistema macroscópico ao qual esta ilha está acoplada é constituído pelos gases eletrônicos à direita e à esquerda da mesma. O acoplamento se dá simplesmente pela possibilidade de elétrons saírem dos gases e entrarem na ilha e vice-versa. Esta transferência de elétrons é dificultada pelo potencial negativo dos contatos metálicos, que estabelece uma barreira de potencial para os elétrons.

Considerar o sistema macroscópico como composto apenas pelos gases bidimensionais é

uma forte simplificação no caso de se querer compreender o comportamento da ilha em todo seu detalhe, pois ela está acoplada a todo material semicondutor na qual está imersa. Uma vez que queremos analisar, neste trabalho, apenas como se dá o transporte eletrônico no gás bidimensional na presença da ilha, consideraremos os materiais semicondutores como um banho térmico (controlando a temperatura) e um reservatório de elétrons (controlando o potencial químico), sem nos preocuparmos em estabelecer as suas interações com a ilha e com os gases bidimensionais.

Notemos que para haver transporte eletrônico neste gás de elétrons é necessário que os elétrons deixem um dos gases, o da esquerda por exemplo, entrem na ilha e finalmente passem ao outro gás. Não há outro caminho possível. A ilha, servindo como contato entre os gases, é o contato quântico pontual do título da dissertação.

Se a ilha estivesse isolada, conteria um determinado número de elétrons, da ordem de 50, que estariam acomodados em um estado de muitos corpos no qual a repulsão coulombiana entre eles tem de ser levada em consideração. Isto porque suas dimensões, sendo pequenas, implicam em uma capacitância pequena, a ponto da entrada de um novo elétron aumentar a energia da ilha por uma quantidade da ordem de 0.1 eV. Podemos estimar isto facilmente notando que, no sistema CGS, a dimensão de capacitância é a de distância, de modo que

$$C \cong \epsilon \times 100 \text{ } \eta\text{m} \cong 10^{-4} \text{cm}, \quad (1.1)$$

já que 100 ηm é a única dimensão característica e a constante dielétrica nos semicondutores é da ordem de 10. Escrevendo a energia como

$$E = \frac{Q^2}{2C}, \quad (1.2)$$

temos que

$$\Delta E = \frac{Q}{C} \Delta Q \quad (1.3)$$

nos dá, para $Q = 50e$ e $\Delta Q = 1e$,

$$\Delta E \cong 0.07 \text{eV}.$$

Figura I-2: Esta figura foi extraída da Ref. 8. Ela nos mostra uma ampliação de 70.000 vezes do conjunto de eletrodos com os quais a ilha é construída.

Esta repulsão eletrônica impedirá o transporte eletrônico através da ilha quando a tensão aplicada for de baixa frequência, o que caracteriza o *bloqueio Coulombiano*. Assim, a princípio, esperamos uma condutância muito baixa ($\ll \frac{e^2}{h}$).

Porém se a temperatura em que este dispositivo estiver operando for suficientemente baixa (mais tarde indicaremos quão baixa), é possível surgir um outro efeito de muitos corpos, o *efeito Kondo*, como previsto já em 1988 por T. K. Ng e P. A. Lee [2], o qual é capaz de superar o bloqueio Coulombiano e nos fornecer condutâncias da ordem de $\frac{e^2}{h}$ no limite de baixas frequências, mais especificamente, no regime DC. Apenas recentemente este efeito pôde ser observado experimentalmente nestes sistemas [8],[9]. As figuras 2 e 3 foram retiradas da Ref. [8]. A 2 mostra o dispositivo experimental, chamado de transistor de um elétron pelos autores, e que é equivalente ao dispositivo esquematizado na figura 1. A 3 mostra resultados experimentais para a condutância DC em função do potencial de gate para algumas temperaturas diferentes e para acoplamentos da ilha com os gases diferentes também.

O efeito Kondo acima mencionado se insere no contexto do problema Kondo, que surgiu após J. Kondo [3], em 1964, explicar o mínimo na resistividade como função da temperatura

Figura I-3: Esta figura também foi extraída da Ref. 8. Ela nos mostra três diferentes gráficos da condutância em função do potencial de gate. Nos dois primeiros o acoplamento com a ilha é suficientemente forte para haver o efeito Kondo. Notemos que com o aumento da temperatura a condutância vai diminuindo. No terceiro gráfico, o acoplamento é fraco, de modo que a temperatura Kondo é menor que 90 mK. Assim temos um gráfico típico do bloqueio Coulombiano, com picos estreitos para a condutância correspondentes a valores do potencial de gate onde a os estados da ilha com diferentes números de ocupação são degenerados.

de metais contendo elementos magnéticos diluídos em concentração bastante baixa ($\sim 0.01\%$). Podemos considerar, por exemplo, cobre contendo átomos de ferro como impurezas. Em virtude da concentração das impurezas magnéticas ser bastante baixa, para calcular o termo de espalhamento da equação de Boltzman devido a elas, Kondo partiu de um Hamiltoniano contendo uma única impureza acoplada à banda de condução. A impureza sendo representada por um spin, $\vec{S}$, localizado (em um orbital d do átomo de Fe). Este Hamiltoniano possui um termo referente à banda de condução e outro contendo o produto escalar entre o spin total da banda e o spin da impureza,

$$H = \sum_k \varepsilon_k c_k^\dagger c_k + J \sum_{k,k'} \left(\frac{1}{2} c_{k,\mu}^\dagger \vec{\sigma}_{\mu,\mu'} c_{k',\mu'} \right) \cdot \vec{S}. \quad (1.4)$$

Quando o acoplamento entre os spins for antiferromagnético ($J > 0$), este Hamiltoniano guiará ao mínimo na resistividade pelo aparecimento de um termo proporcional ao $\ln T$, quando o cálculo é feito por teoria de perturbação. Portanto, apesar de nos dar o mínimo corretamente, este resultado diverge quando $T \rightarrow 0$, e a busca pela eliminação desta divergência caracteriza o problema Kondo.

Cálculos posteriores, não apenas da resistividade, mas de propriedades termodinâmicas da impureza, como susceptibilidade magnética, entropia e calor específico, feitos com teoria de perturbação de ordem infinita, isto é, somando-se classes inteiras de diagramas, não conseguiram eliminar a divergência, mas deslocá-la da origem para uma nova temperatura, chamada de *temperatura Kondo*,

$$k_B T_K \sim D e^{-\frac{1}{\rho J}}, \quad (1.5)$$

que estabelece uma nova escala de energia para o problema. Nessa expressão D é a meia-largura da banda de condução e ρ a densidade de estados no nível de Fermi.

O problema de Kondo só foi resolvido em 1975, por K. G. Wilson [4], aplicando ao problema as técnicas do *Grupo de Renormalização Numérico* desenvolvido por ele mesmo para estudar transições de fase. Sobre o Grupo de Renormalização Numérico falaremos mais no capítulo 3, mas aqui adiantamos que apesar de ser um método numérico, ele é capaz de fornecer resultados essencialmente exatos.

É condição essencial, portanto, para ocorrer o efeito Kondo, haver na ilha um número ímpar

de elétrons, de modo a termos lá momento magnético de spin (S_z) diferente de zero, o qual está localizado dentro da ilha. Um dos contatos na Fig. 1 controla o potencial da ilha, o qual é comumente denominado de potencial de gate. Acontece que alterando-se este potencial podemos alterar o número de elétrons na ilha, pois podemos aumentá-lo tanto, que, apesar da repulsão, seja vantajosa a entrada de mais um elétron. E assim podemos atingir a condição necessária para a ocorrência do efeito Kondo, pelo menos no que se refere ao número de elétrons na ilha. Para tornar isto mais claro, vale a pena discutir preliminarmente nosso modelo para a ilha isolada.

Como já mencionado, trata-se de uma região isolada de um gás de elétrons e que, na hipótese de isolamento perfeito, contém um certo número fixo de elétrons em seu estado fundamental. Essa ilha apresenta uma capacitância suficientemente baixa para que a entrada de um novo elétron custe uma energia da ordem de 0.1 eV .

Assim, a ilha isolada contendo N elétrons possui energia (subtraída de μN , onde μ é o potencial químico) igual a ^[5]

$$E(N) = (-eV_g - \mu)N + \frac{U}{2}N(N-1), \quad (1.6)$$

onde

$-e =$ carga do elétron;

$V_g =$ potencial de gate;

$U =$ energia de repulsão entre dois elétrons na ilha.

O parâmetro U está diretamente ligado à capacitância da ilha, pois para $N \gg 1$ temos

$$\begin{aligned} \frac{Q^2}{2C} &= \frac{U}{2}N(N-1) \cong \frac{U}{2}N^2 = \frac{U}{2} \frac{Q^2}{e^2} \Rightarrow \\ C &= \frac{e^2}{U}, \end{aligned} \quad (1.7)$$

assim $U \approx 1.4 \times 10^{-2} \text{ eV}$, quando $C \approx 10^{-5} \text{ cm}$.

Seja N_0 o número inteiro mais próximo do valor $N_{\min}$ que minimiza a função $E(N)$,

$$N_{\min} = \frac{eV_g + \mu}{U} + \frac{1}{2}. \quad (1.8)$$

Figura I-4: A parábola à esquerda representa a energia da impureza no modelo de Anderson em função do número de elétrons presentes na mesma. A segunda parábola representa a energia da ilha. Com convenientes parâmetros ϵ_d e U a parábola de Anderson pode, após uma translação, ser superposta à parábola da ilha, onde o estado com nenhum elétron torna-se equivalente ao estado com 50 elétrons na segunda, o com 1 elétron torna-se equivalente ao estado com 51 elétrons na ilha e o com 2 elétrons ao estado com 52 elétrons na ilha.

Nós poderemos, como indica a Fig. 4, nos restringir ao fundo da parábola, ou seja, considerar como possíveis configurações apenas aquela com N_0 elétrons e suas vizinhas com $N_0 - 1$ e $N_0 + 1$ elétrons. As demais configurações demandam muita energia para serem acessadas. Fica claro agora como o número de elétrons na ilha depende de V_g .

A princípio, N_0 pode ser um número par ou ímpar, mas nós estamos interessados em estudar o efeito Kondo, que, como vimos, requer um número ímpar de elétrons na ilha de modo a seu estado fundamental ser degenerado ($\uparrow, \downarrow$), e assim escolheremos N_0 não como o inteiro mais próximo de $N_{\min}$, mas como o inteiro *ímpar* mais próximo do ponto de mínimo.

Uma vez que $N_{\min}$ depende de V_g , um incremento muito grande no potencial de gate pode deslocar N_0 de um valor para outro. No entanto, para valores de V_g tais que

$$U(N_0 - \frac{1}{2}) < eV_g + \mu < U(N_0 + \frac{1}{2}), \quad (1.9)$$

o número ímpar mais próximo de $N_{\min}$ é sempre N_0 .

No modelo de Anderson, como veremos a seguir, temos um orbital acoplado a uma banda de condução. Este orbital naturalmente pode conter $n_d = 0, 1$ ou 2 elétrons, onde a energia da configuração com 1 elétron é ϵ'_d e a da configuração com dois elétrons (de spins opostos) no orbital é $2\epsilon'_d + U'$, onde U' vem da repulsão Coulombiana. Desse modo, o modelo de Anderson também define uma parábola para a energia em função de n_d ,

$$E_{Anderson}(n_d) = (\epsilon'_d - \mu)n_d + \frac{U'}{2}n_d(n_d - 1). \quad (1.10)$$

Para estabelecermos a equivalência entre nosso modelo para a ilha e o de Anderson, fazemos a seguinte correspondência

$$\begin{aligned} N_0 - 1 \text{ elétrons} &\rightarrow \text{orbital do mod. Anderson sem elétrons, } n_d = 0 \\ N_0 \text{ elétrons} &\rightarrow \text{orbital do mod. Anderson com 1 elétron, } n_d = 1 \\ N_0 + 1 \text{ elétrons} &\rightarrow \text{orbital do mod. Anderson com 2 elétrons, } n_d = 2 \end{aligned}$$

e, então, basta fixarmos N_0 e ajustarmos os parâmetros ϵ'_d e U' de modo que as parábolas coincidam (a menos de um deslocamento uniforme na energia) após trasladarmos a parábola da energia de Anderson por $N_0 - 1$ unidades. Desta forma, temos as seguintes equações para a equivalência:

$$\begin{aligned} N &= N_0 - 1 + n_d, \\ \epsilon_d &= \epsilon'_d - \mu = -eV_g - \mu + U(N_0 - 1), \\ U &= U'. \end{aligned}$$

Nosso problema, como se vê, é periódico: para um dado V_g , existe um N_0 determinado pela Eq. 1.8 (e pela condição dele ser o número inteiro ímpar mais próximo de $N_{\min}$). Enquanto V_g pertencer ao intervalo 1.9, N_0 permanecerá fixo. Se V_g escapar deste intervalo, N_0 será incrementado (ou decrementado) de 2, e a análise do problema se repete.

Em correspondência ao intervalo em que V_g varia mas N_0 permanece fixo, temos o seguinte intervalo para ϵ_d :

$$\left[-\frac{3U}{2}, \frac{U}{2}\right], \quad (1.11)$$

e apenas neste intervalo a equivalência entre os dois modelos faz sentido. Fora desse intervalo, basta mudarmos N_0 para $N_0 \pm 2$ e estabelecermos outra equivalência.

Daqui para frente, então, consideraremos a ilha como podendo estar ocupada com 0 elétron (energia = 0) ou com 1 elétron (energia = ϵ_d) ou com 2 elétrons (energia = $2\epsilon_d + U$). Notando que as energias estão medidas em relação ao nível de Fermi.

Se variarmos V_g , $N_{\min}$ passará a estar mais próximo de outro número ímpar, e então a situação toda se repete, mas agora em torno de um novo N_0 . Isto quer dizer que nosso modelo nos fornece uma periodicidade perfeita da condutância com o potencial de gate, o que, como vimos nas curvas experimentais apresentadas acima, não corresponde à realidade, onde tínhamos que os dois pares de picos eram diferentes. Esta diferença sendo devida ao fato da estrutura de níveis de energia na ilha ser certamente mais complicada do que aquela utilizada por nós. Assim podemos dizer que nosso modelo descreve um dos períodos do gráfico da condutância em função de V_g . E para percorrermos este período variamos ϵ_d no intervalo acima, não tendo sentido para nós o cálculo com outros valores de ϵ_d .

Em gráficos da condutância DC em função do potencial de gate, V_g , como aqueles da Fig. 3, esperamos encontrar picos em valores do potencial de gate para os quais há *degenerescência* entre dois dos estados da ilha, pois no caso de um campo externo estático não temos de onde obter energia para fazer uma transição entre estados com diferentes números de ocupação da ilha e é apenas através destas transições que pode haver condução em nosso dispositivo. Podemos ter degenerescência entre o estado com $N_0 - 1$ e estados com N_0 elétrons, isto é,

$$\begin{aligned} \epsilon_d &= -eV_g - \mu + U(N_0 - 1) = 0 \Rightarrow \\ eV_g &= U(N_0 - 1) - \mu. \end{aligned} \quad (1.12)$$

E também entre o estado com N_0 e $N_0 + 1$ elétrons, onde

$$\begin{aligned}
\epsilon_d + U &= -eV_g - \mu + UN_0 = 0 \Rightarrow \\
eV_g &= UN_0 - \mu.
\end{aligned}
\tag{1.13}$$

Desta forma a separação entre os picos é igual a

$$\frac{U}{e} = \frac{e}{C}.
\tag{1.14}$$

O gráfico na Fig. 3c ilustra bem claramente estes picos periodicamente espaçados, os quais são a característica do bloqueio Coulombiano. Este gráfico corresponde à situação em que o acoplamento da ilha com os gases eletrônicos é bem fraco e a temperatura Kondo muito baixa (< 90 mK), de modo que os picos são bem estreitos.

Até aqui, discutimos a ilha isolada. Cabe agora levar em conta o efeito do acoplamento da ilha com o gás de elétrons. Sem acoplamento, não há condutância, pois não há como um elétron fazer uma transição entre um estado no gás eletrônico e um estado na ilha. Em princípio poderíamos esperar que variações no acoplamento apenas mudariam a forma dos picos, mas ainda deixando-os com altura e largura bem definidas. No entanto quando o potencial de gate é tal que há um número ímpar de elétrons na ilha, ele faz muito mais. E podemos ver isso pelos gráficos das Fig. 3a e 3b, onde se destacam pares de picos, sendo que dentro de cada par a condutância é significativamente alta entre os picos, ao contrário do gráfico da Fig. 3c. Este incremento na condutância entre os picos é a característica principal do efeito Kondo neste dispositivo. Cada par de picos está em uma região de valores para V_g onde há um número ímpar de elétrons na ilha, e as regiões entre os pares correspondem à ocupação da ilha por um número par de elétrons. Mas o que é o efeito Kondo?

O efeito Kondo se caracteriza pela formação de um estado fundamental onde o momento magnético localizado da ilha se une a um estado do gás de elétrons formando um singleto. Se for feita uma medida durante um tempo $\gtrsim \frac{\hbar}{k_B T_K}$, ela será capaz de detectar a inversão do spin da ilha que ocorre num período desta ordem. Para que o momento magnético total permaneça nulo, a banda acompanha esta inversão, fazendo com que os elétrons com energia da ordem de $k_B T_K$ gastem um tempo razoável em torno da impureza, o que aumenta o espalhamento

Figura I-5: Representação da inversão do spin da impureza no modelo de Anderson. É necessária uma transição virtual para um estado em que o número de elétrons na impureza seja igual a 2, onde o elétron a mais provém da banda de condução. Também poderíamos ter uma transição virtual onde o número de elétrons na impureza passasse de 1 a 0, com o elétron sendo enviado à banda de condução.

destes elétrons e dá margem ao crescimento da resistividade com a diminuição da temperatura para $T < T_K$. Em nosso caso, onde a impureza não é apenas um centro espalhador, mas é uma região pela qual os elétrons são obrigados a passar para haver condução eletrônica, estas inversões aumentam a condutância em frequências $\lesssim k_B T_K / \hbar$, pois para inverter o spin a ilha tem de passar por estados intermediários com $N_0 - 1$ ou $N_0 + 1$ elétrons (Fig. 5).

As regiões de baixa condutância entre os pares, estão em torno de valores de V_g correspondentes à ilha com número par de elétrons, onde não ocorre o efeito Kondo.

O objetivo desta dissertação é a determinação da condutância deste gás de elétrons separado em dois e tendo a ilha como contato entre eles. Analisaremos a condutância no regime de resposta linear, em que calculamos o limite da razão $\frac{I}{V}$ quando $V \rightarrow 0$, bem como consideraremos a temperatura igual a zero.

Estudaremos, por meio do Grupo de Renormalização Numérico, a condutância em função da frequência e também a dependência da condutância DC em relação ao potencial de gate, que controla o número de elétrons na ilha, de modo a podermos compreender a disputa entre os dois efeitos de muitos corpos que governam o funcionamento de um dispositivo como o da Fig. 2. Tais dispositivos constituem, em verdade, ótimos laboratórios para o estudo experimental destes efeitos, mas com o acelerado progresso na tecnologia de nanofabricação, é de se esperar que eles possam vir a ter aplicação bem mais prática daqui a alguns anos.

Ainda não temos encontrado na literatura esta análise em função da frequência, sendo ela,

portanto, complementar à grande variedade de trabalhos existentes sobre este tipo de contato quântico pontual, onde são estudadas a dependência da condutância DC com a temperatura e também o regime não linear. É interessante notarmos que quando nosso dispositivo encontra-se a uma dada temperatura T , ele troca energia com o banho térmico com uma frequência da ordem de $\frac{\hbar}{k_B T}$, de modo que a observação da dependência da condutância com a frequência e a $T = 0$ K nos dá também um panorama para a dependência da condutância DC com a temperatura. Na Fig. 6 temos um gráfico da condutância em função da frequência. A curva vermelha corresponde a uma situação sem sentido do ponto de vista de nosso dispositivo, pois ela corresponde a $U = 0$. Porém, vemos que para altas frequências, a curva correspondente ao caso realista de $U \neq 0$ coincide com essa curva, que pode ser obtida analiticamente. O mais importante neste gráfico é o enorme aumento da condutância quando a frequência se aproxima de zero. Este é o efeito Kondo. A curva azul corresponde a uma curva universal contendo como parâmetro de ajuste a temperatura Kondo.

Na Fig. 7, há um gráfico da condutância DC em função de ε_d (em preto), sendo este parâmetro variado no intervalo $[-\frac{3U}{2}, \frac{U}{2}]$ pelas razões estabelecidas acima.

Nesse gráfico, a curva dada pelos pontos pretos representa um par de picos como aqueles presentes nas Fig. 3a e 3b, e vemos um grande patamar de alta condutância em todo intervalo $[-\frac{U}{2}, 0]$, sendo que fora do mesmo a condutância cai rapidamente. Como a temperatura foi tomada igual a 0 K, o vale entre os picos perdeu toda profundidade e deu origem a um patamar. Juntamente, há a curva dada pelos pontos vermelhos, que nos dá o número médio de elétrons na ilha. Observamos que o patamar corresponde à situação onde há 1 elétron na ilha, o qual representa um momento magnético localizado e dá margem ao efeito Kondo.

Esta dissertação está organizada da seguinte forma. No capítulo 2, detalharemos o modelo por nós utilizado na abordagem ao problema, onde chegaremos ao Hamiltoniano de Anderson [10] e estabeleceremos uma expressão para a condutância em função da frequência. Esta expressão tem um caráter geral e é utilizada posteriormente nos cálculos numéricos. Mas ela pode ser desenvolvida algebricamente um pouco mais e, então, chegamos a uma relação entre a condutância e a densidade espectral do estado da ilha. Esta relação é particularmente interessante para tomarmos o limite da frequência indo a zero, onde conseguiremos relacionar a condutância DC com a defasagem dos estados eletrônicos no nível de Fermi.

No capítulo 3 abordaremos o Grupo de Renormalização Numérico aplicado ao nosso pro-

Figura I-6: Condutância em função da frequência no caso simétrico, $2\epsilon_d + U = 0$. Para alta frequência, há um pico que pode ser ajustado por uma curva (vermelha) correspondente ao caso $U = 0$. Para frequências baixas, a condutância aumenta significativamente devido ao efeito Kondo. Esta subida pode ser ajustada por uma curva universal (azul), cujo único parâmetro de ajuste é a temperatura Kondo.

Figura I-7: Relação entre o valor da condutância DC e o número de ocupação da ilha. Quando o parâmetro ϵ_d passa a favorecer a ocupação da ilha por 1 elétron a condutância aumenta rapidamente.

blema, bem como estabeleceremos um procedimento de cálculo para a condutância.

No capítulo 4 apresentaremos e discutiremos os resultados encontrados, para finalmente, no capítulo 5, procedermos com nossas conclusões.

Capítulo II

Modelo

II.1 Simplificações para os gases eletrônicos e Hamiltoniano para o problema

O arranjo experimental esquematizado na Introdução apresentava dois gases bidimensionais de elétrons acoplados à ilha, mas não entre si. Esses gases eletrônicos se formam na interface entre dois semicondutores com “gaps” diferentes, onde elétrons de um deles passam para o outro, de modo que ficamos com um dos semicondutores contendo uma região com carga espacial negativa ao longo do plano da interface e com uma espessura que depende dos semicondutores, mas é da ordem de $100 \text{ \AA}$. Certamente há repulsão entre os elétrons deste gás, sendo ela a responsável por equilibrar a tendência de fluxo de elétrons vindos do outro semicondutor. O campo elétrico nessa região, no entanto, é perpendicular à interface e não influencia na dinâmica ao longo da mesma. O número de elétrons no gás se estabiliza. Assim, o fluxo eletrônico perpendicular à superfície é, em média, nulo e pode ser ignorado. Quanto ao movimento eletrônico paralelo à superfície, a repulsão Coulombiana faz variar a energia dos gases cada vez que um elétron é transferido de (ou para) a ilha. Essa variação, no entanto, pode ser desprezada pois a capacitância do gás é muito grande, já que suas dimensões ao longo da interface são macroscópicas. De modo que temos gases de elétrons livres.

Outra simplificação foi considerar os gases eletrônicos unidimensionais. Esta simplificação se justifica porque o acoplamento da ilha com um dado gás define um conjunto unidimensional

– um canal – de estados de base. Embora a base completa das funções de onda do gás inclua um infinidade de outros estados, estes estão desacoplados da ilha e podem ser desconsiderados. Para visualizarmos esse desacoplamento, é útil considerar um gás com geometria semicircular. Se o acoplamento entre ilha e gás for uniforme, a ilha só se acoplará com funções de onda do gás independentes do ângulo polar. Nesse caso, o canal e a unidimensionalidade do sistema seriam definidos pela variável radial. Geometrias mais complexas exigiriam um esforço maior para se definir o canal acoplado com a ilha, mas as conclusões seriam idênticas.

Há, de fato, trabalhos ^[12] que consideram dois canais, mas pelas razões descritas acima esta complexidade não deveria trazer mudanças qualitativas para o sistema que estamos estudando e pode, aliás, conduzir a situações simplesmente não condizentes com a realidade, no caso de se ficar admitindo canais e diferentes formas de acoplamento dos mesmos com a ilha de modo muito arbitrário.

Para calcularmos a condutância, deveríamos analisar a resposta de nosso dispositivo quando este é submetido a uma diferença de potencial entre os dois gases. Essa diferença de potencial normalmente é introduzida considerando que os gases de elétrons à esquerda e à direita da ilha possuem potenciais químicos diferentes, gerando uma situação de não-equilíbrio, onde se estabelece uma corrente elétrica estacionária. Nós abordaremos o problema de outra maneira. Em lugar de ter uma bateria fechando o circuito entre os gases e mantendo a diferença de potencial entre eles constante, nós uniremos os dois gases (Fig. 1) formando um anel e consideraremos a existência de um fluxo magnético variável no tempo através dele. Esse fluxo gerará a força eletromotriz em nosso circuito. Essa abordagem é baseada nos trabalhos de Kohn ^[13] e Shastry ^[14].

Para introduzirmos o potencial vetor em nosso Hamiltoniano, consideramos o nosso anel como sendo constituído de N sítios (um deles sendo a ilha) e montamos um Hamiltoniano tight-binding que, na ausência de potencial vetor, tem a seguinte forma:

$$H = \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \left(\sum_{j=0}^{N-1} (t_j c_{j,\sigma}^\dagger c_{j+1,\sigma} + h.c.) + \epsilon_d c_{0,\sigma}^\dagger c_{0,\sigma} \right) + U n_\uparrow n_\downarrow, \quad (2.1)$$

onde as energias estão medidas em relação ao nível de Fermi e

$c_j^\dagger$ cria um elétron no sítio j ;

Figura II-1: Os gases eletrônicos, após serem considerados unidimensionais, são unidos para formar um anel, onde são tratados no esquema tight-binding, daí a presença dos sítios ao longo do anel. A ilha, sítio 0 na figura, se diferencia dos demais sítios por haver a repulsão Coulombiana na mesma e pela taxa de tunelamento entre ela e seus sítios vizinhos ser V ao invés de t . Com $V \ll t$, procuramos representar uma barreira de potencial entre os gases eletrônicos e a ilha. A força eletromotriz provém do fluxo magnético variável no tempo através do anel.

$$t_j = \begin{cases} V, & \text{se } j = 0 \text{ e } j = N - 1 \\ t, & \text{para os demais valores de } j \end{cases};$$

ϵ_d é a energia de um elétron na ilha, correspondente ao sítio $j = 0$;

U é a energia de repulsão entre os elétrons dentro da ilha e

$$n_{\uparrow} = c_{0,\uparrow}^{\dagger} c_{0,\uparrow}.$$

O termo de “hopping” entre a ilha e os sítios adjacentes a ela é tomado ser diferente daquele entre os demais sítios. Consideraremos $V \ll t$ para representar a existência da barreira de potencial entre os gases eletrônicos e a ilha.

Na presença de potencial vetor uniforme $\mathbf{A}$ ao longo do anel, o Hamiltoniano passa a ser

$$H = \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \left(\sum_{j=0}^{N-1} (t_j e^{i\phi} c_{j,\sigma}^{\dagger} c_{j+1,\sigma} + h.c.) + \epsilon_d c_{0,\sigma}^{\dagger} c_{0,\sigma} \right) + U n_{\uparrow} n_{\downarrow}, \quad (2.2)$$

onde

$\phi = \frac{eAa}{\hbar c}$, a é a distância entre os sítios ao longo do anel e A é o valor do potencial vetor.

Vemos a simplicidade com que o potencial vetor pôde ser introduzido no Hamiltoniano: bastou trocar t_j por $t_j e^{\pm i\phi}$. No Apêndice A justificamos este ponto.

A seguir, submeteremos o Hamiltoniano a algumas transformações de gauge: consideremos operadores a_j tais que

$$c_j^{\dagger} = e^{j(i\phi)} a_j^{\dagger}, \quad (2.3)$$

com os quais o Hamiltoniano é reescrito na forma

$$\begin{aligned} H = & \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \sum_{j=1}^{N-2} \left((t a_{j,\sigma}^{\dagger} a_{j+1,\sigma} + h.c.) + \epsilon_d a_{0,\sigma}^{\dagger} a_{0,\sigma} \right) + \\ & \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \left(V e^{i\theta} a_{N-1,\sigma}^{\dagger} a_{0,\sigma} + h.c. \right) + \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \left(V a_{0,\sigma}^{\dagger} a_{1,\sigma} + h.c. \right) \\ & + U n_{\uparrow} n_{\downarrow}. \end{aligned} \quad (2.4)$$

Com uma segunda transformação, envolvendo apenas os operadores a_1 e a_{N-1} , podemos deixá-lo simétrico em relação ao sítio da ilha:

$$\begin{aligned} a_{N-1} & \rightarrow e^{i\frac{\theta}{2}} a_{N-1}, \\ a_1 & \rightarrow e^{i\frac{\theta}{2}} a_1, \end{aligned} \quad (2.5)$$

Figura II-2: A variação da fase na taxa de tunelamento ao longo do anel pode ser visualizada através de uma espiral com eixo circular em que a rotação é proporcional à fase. Uma mudança de gauge é feita simplesmente arrastando as voltas da espiral de tal modo que elas fiquem concentradas em uma pequena faixa do anel. Aqui ela ficou concentrada entre os sítios vizinhos à ilha.

$$H = \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \sum_{j=1}^{N-2} \left((ta_{j,\sigma}^\dagger a_{j+1,\sigma} + h.c.) + \epsilon_d a_{0,\sigma}^\dagger a_{0,\sigma} \right) + \quad (2.6)$$

$$\sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \left(V e^{i\frac{\theta}{2}} a_{N-1,\sigma}^\dagger a_{0,\sigma} + h.c. \right) + \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \left(V e^{i\frac{\theta}{2}} a_{0,\sigma}^\dagger a_{1,\sigma} + h.c. \right) + U n_\uparrow n_\downarrow, \quad (2.7)$$

onde

$$\theta = \frac{eAL}{\hbar c} \text{ e } L = Na = \text{comprimento do anel.}$$

Essas transformações de gauge podem ser visualizadas geometricamente como esquematizado na Fig. 2.

Para finalizarmos esta sequência de transformações sobre o Hamiltoniano (embora no capítulo seguinte haja uma outra dentro do contexto do Grupo de Renormalização Numérico), vamos considerar a parte do Hamiltoniano que não envolve o sítio da ilha e escrevê-la na forma diagonal

$$H_{banda} = \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \sum_{m=1}^{N-1} \varepsilon(k_m) c_{k_m,\sigma}^\dagger c_{k_m,\sigma}, \quad (2.8)$$

onde

$$a_j^\dagger = \sqrt{\frac{2}{N}} \sum_{m=1}^{N-1} \text{sen}(jk_m a) c_{k_m}^\dagger, \quad 1 \leq j \leq N-1, \quad (2.9)$$

$$k_m = \frac{m\pi}{Na} \text{ e} \quad (2.10)$$

$$\varepsilon(k_m) = 2t \cos(k_m a). \quad (2.11)$$

A função $\varepsilon(k_m)$ está limitada entre $-2t$ e $2t$, motivo pelo qual identificamos este termo do Hamiltoniano por H_{banda} . À temperatura igual a zero, teremos essa banda semipreenchida.

Em termos dos operadores c_{k_m} , o Hamiltoniano completo assume a forma

$$\begin{aligned} H = & H_{banda} + \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \sum_m \left(V(k_m, \theta) c_{k_m, \sigma}^\dagger c_{0, \sigma} + h.c. \right) + \epsilon_d c_{0, \sigma}^\dagger c_{0, \sigma} \\ & + U n_\uparrow n_\downarrow, \end{aligned} \quad (2.12)$$

onde

$$V(k_m, \theta) = \sqrt{\frac{2}{N}} V \text{sen}(k_m a) [-(-1)^m e^{i\frac{\theta}{2}} + e^{-i\frac{\theta}{2}}]. \quad (2.13)$$

Na ausência de potencial vetor, ou seja $\theta = 0$, parte dos operadores $c_{k_m}^\dagger$ se desacopla da ilha e ficamos com

$$H = H_{acoplado} + H_{desacoplado} \quad (2.14)$$

onde

$$\begin{aligned} H_{acoplado} = & \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \sum_{m \text{ ímpar}} \left(\varepsilon(k_m) c_{k_m, \sigma}^\dagger c_{k_m, \sigma} \right) + \\ & \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \sum_{m \text{ ímpar}} 2V \sqrt{\frac{2}{N}} \text{sen}(k_m a) \left(c_{k_m, \sigma}^\dagger c_{0, \sigma} + h.c. \right) + \\ & \epsilon_d c_{0, \sigma}^\dagger c_{0, \sigma} + U n_\uparrow n_\downarrow \end{aligned} \quad (2.15)$$

e

$$H_{desacoplado} = \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \sum_{m \text{ par}} \varepsilon(k_m) c_{k_m, \sigma}^\dagger c_{k_m, \sigma}. \quad (2.16)$$

O Hamiltoniano acoplado acima é exatamente o Hamiltoniano do Modelo de Anderson, que contém uma banda de condução, um orbital localizado e um termo de hibridização entre este

Figura II-3: No modelo de Anderson a ilha possui 4 configurações possíveis: vazia, um elétron com spin $\uparrow$, um elétron com spin $\downarrow$ ou 2 elétrons. E ela está acoplada a uma banda de condução.

orbital e a banda(Fig. 3).

II.2 Breve exposição do Modelo de Anderson

O modelo surgiu em 1961 ^[10]. Anderson procurava estabelecer condições necessárias para a existência de momentos magnéticos localizados em metais contendo impurezas magnéticas diluídas em concentrações bem baixas. Aquele trabalho analisa o Hamiltoniano com base em uma aproximação de Hartree e Fock que o tempo mostrou ser inadequada.

O Hamiltoniano de Anderson, como passou a ser conhecido o Hamiltoniano desse modelo, possui quatro termos:

$$H = H_1 + H_2 + H_3 + H_4, \quad (2.17)$$

$H_1 = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \varepsilon_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}, \sigma}$. Este termo descreve a banda de condução. O operador $c_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger$ cria um elétron em um estado de Bloch com spin σ . Efeitos da interação elétron-elétron são englobados na relação de dispersão $\varepsilon_{\mathbf{k}}(k)$.

$H_2 = \sum_{\sigma} \varepsilon_d c_{d, \sigma}^\dagger c_{d, \sigma}$. Este termo descreve um orbital d localizado. Os modelos até então utilizados para compreender o surgimento de momentos magnéticos localizados em ligas fracamente diluídas não incluíam este orbital. Supunha-se que o potencial era alterado pela presença do átomo da impureza e esta alteração conduzia a estados ligados virtuais, mas esta abordagem não vinha obtendo sucesso. O estado localizado foi incluído sob o argumento de que a banda

de condução, sendo formada a partir de ondas s , tem seus estados praticamente ortogonais à função de onda do orbital d .

$H_3 = Un_{\uparrow}n_{\downarrow}$, onde $n_{\sigma} = c_{d,\sigma}^{\dagger}c_{d,\sigma}$. Este termo descreve a repulsão entre dois elétrons de spins opostos ocupando o orbital d . A repulsão entre elétrons foi considerada significativa apenas nessa situação e a repulsão entre um elétron na banda e um no orbital d foi considerada negligenciável.

$H_4 = \sum_{\mathbf{k},\sigma} V_{\mathbf{k}}(c_{\mathbf{k},\sigma}^{\dagger}c_{d,\sigma} + c_{d,\sigma}^{\dagger}c_{\mathbf{k},\sigma})$. Este termo permite o acoplamento entre o orbital e a banda de condução. É costume considerar $V_{\mathbf{k}}$ constante, tomando-se seu valor no nível de Fermi.

Esse modelo, que devido à repulsão entre os elétrons no orbital d , define um problema de muitos corpos, também só foi satisfatoriamente resolvido com o Grupo de Renormalização Numérico. As contribuições da impureza à susceptibilidade magnética e às propriedades termodinâmicas da liga fracamente diluída, tais como calor específico e entropia, foram calculadas em função da temperatura [6],[7],[17].

Outra propriedade de interesse que pôde ser calculada utilizando-se o GRN foi a densidade espectral do nível ε_d [15].

Os parâmetros relevantes no modelo são a energia do orbital, ε_d , a repulsão Coulombiana, U e a largura do nível ε_d , $\Gamma = \pi\rho V^2$, onde ρ é a densidade de estados no nível de Fermi. A Fig. 4 ilustra possíveis escolhas de valores para estes parâmetros. Cada uma dessas escolhas dá margem a diferentes situações físicas e neste sentido o Hamiltoniano de Anderson é bastante rico, apesar de sua aparente simplicidade. A Fig. 4a representa o caso dito simétrico, onde há simetria partícula-buraco. Mais precisamente o caso em que a transformação

$$\begin{aligned} c_k^{\dagger} &\rightarrow c_{\frac{\pi}{a}-k} \\ c_0^{\dagger} &\rightarrow -c_0 \end{aligned}$$

não altera o Hamiltoniano de Anderson.

O caso ilustrado nas Fig. 4a e 4c, onde a ocupação do orbital por um elétron está altamente favorecida, corresponde à situação física de momento magnético localizado. Nessa situação há equivalência [18] entre os Hamiltonianos de Anderson e Kondo,

$$H_{Kondo} = \sum_{\mathbf{k},\sigma} \varepsilon_k c_{\mathbf{k},\sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k},\sigma} + J \sum_{\substack{\mathbf{k},\mathbf{k}', \\ \mu,\nu}} c_{\mathbf{k},\mu}^{\dagger} \vec{\sigma}_{\mu,\nu} c_{\mathbf{k},\nu} \cdot \vec{T}, \quad (2.18)$$

Figura II-4: Alguns possíveis conjuntos de parâmetros para o Modelo de Anderson: a) caso simétrico, onde $2\epsilon_d + U = 0$. A faixa representa a largura do nível, $\Gamma = \pi\rho V^2$, e neste caso, $\Gamma \ll |\epsilon_d|$; b) caso em que $U < |\epsilon_d|$ e no estado fundamental da ilha há dois elétrons na mesma; c) caso em que $-\epsilon_d < \epsilon_d + U < 0$; d) caso em que $\Gamma \gg |\epsilon_d + U|$; e) caso em que $\epsilon_d, U > 0$.

onde $\vec{\sigma} = \sigma_x \hat{x} + \sigma_y \hat{y} + \sigma_z \hat{z}$; $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$ são as matrizes de Pauli e $\vec{r}$ representa um momento magnético de spin localizado no orbital d .

O valor do parâmetro J , nesta equivalência, é dado por

$$\rho J = -\frac{2\Gamma}{\pi |\epsilon_d|} - \frac{2\Gamma}{\pi (\epsilon_d + U)}. \quad (2.19)$$

O Hamiltoniano de Anderson não fornece elementos de matriz entre dois estados com mesma ocupação do orbital e spins opostos, assim para se fazer esta equivalência com o Hamiltoniano de Kondo, temos de considerar transições virtuais do espaço com o orbital d simplesmente ocupado para o espaço com o orbital vazio ou para o espaço com o orbital duplamente ocupado e, destes, de volta ao espaço de simples ocupação do orbital d (Fig. 5).

No capítulo seguinte, onde tratamos da abordagem de nosso problema pelo GRN, analisaremos com mais detalhe alguns casos particulares para os parâmetros do modelo de Anderson, e também veremos que para uma dada escolha de parâmetros, a depender da escala de energia onde se quer determinar uma propriedade física do modelo, este pode se comportar de diferentes maneiras, correspondentes a diferentes situações como as ilustradas na Fig. 4.

Figura II-5: Para a equivalência entre os modelos de Kondo e Anderson é necessário considerar transições virtuais no modelo de Anderson entre estados com diferentes números de ocupação da ilha.

II.3 Cálculo da condutância em função da frequência no regime de resposta linear

Vamos tratar o potencial vetor como perturbação e assim calcular o valor médio da corrente num instante t , admitindo-se que o potencial vetor tenha sido ligado adiabaticamente. Como estamos interessados em calcular a resposta linear, ou seja, os termos da corrente elétrica que são proporcionais à força eletromotriz em nosso anel, podemos realizar os cálculos retendo apenas termos de primeira ordem.

Assim nosso Hamiltoniano pode ser escrito como $H = H_0 + W$, onde

$$\begin{aligned} H_0 &= H_{acoplado} + H_{desacoplado} \text{ e} \\ W &= \frac{Vi\theta(t)}{2}(c_{N-1,\sigma}^\dagger c_{0,\sigma} + c_{0,\sigma}^\dagger c_{1,\sigma} - h.c.). \end{aligned} \quad (2.20)$$

A função $\theta(t)$ é dada por

$$\theta(t) = \frac{eL}{\hbar c} A(t) = -c \int_{-\infty}^{+\infty} E(\omega) d\omega \int_{-\infty}^t e^{-i\omega\tau + \eta\tau} d\tau, \quad (2.21)$$

onde $E(\omega)$ é a transformada de Fourier do campo elétrico.

Para prosseguir, devemos antes de mais nada escrever o operador corrente elétrica para o nosso sistema. No Apêndice A provamos que ele é equivalente a

$$I = -\frac{e}{\hbar} \frac{dH}{d\theta}, \quad (2.22)$$

onde H é o Hamiltoniano. E deste modo temos

$$W = -\frac{\hbar}{e} I\theta(t). \quad (2.23)$$

Sendo $|\psi_I(t)\rangle$ a função de onda de nosso anel na representação da interação em um dado instante t , então

$$|\psi_I(t)\rangle = U(t) |\psi_I(-\infty)\rangle, \text{ com} \quad (2.24)$$

$$U(t) = \left(1 + \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t W_I(\tau) d\tau + \frac{i^2}{\hbar^2} \int_{-\infty}^t W_I(\tau) \int_{-\infty}^{\tau} W_I(\tau') d\tau' d\tau + \dots\right), \quad (2.25)$$

lembrando que

$$W_I(\tau) = \exp\left(\frac{iH_0\tau}{\hbar}\right) W(\tau) \exp\left(-\frac{iH_0\tau}{\hbar}\right). \quad (2.26)$$

Portanto o valor médio do operador corrente em um dado instante fica sendo

$$\begin{aligned} \langle I \rangle(t) &= \langle \psi_I(-\infty) | I_I(t) | \psi_I(-\infty) \rangle + \\ &\quad \langle \psi_I(-\infty) | \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t [I_I(t), W_I(\tau)] d\tau | \psi_I(-\infty) \rangle + \dots \end{aligned} \quad (2.27)$$

Se considerarmos que em $t \rightarrow -\infty$, o anel está no estado fundamental do operador H_0 , que nós representaremos por $|0\rangle$, e ainda notarmos que o primeiro termo da equação acima é igual a zero, pois não há corrente na ausência de campo externo, chegaremos, após algumas manipulações algébricas, à seguinte equação

$$\langle I \rangle(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} E(\omega) e^{-i\omega\tau + \eta\tau} G(\omega) d\omega,$$

onde

$$\begin{aligned} \text{Re}\{G(\omega)\} &= 2\pi\hbar \sum_{n \neq 0} |\langle 0 | I_0 | n \rangle|^2 \delta(E_{n0}^2 - (\hbar\omega)^2) + \\ &\quad \pi\hbar \sum_{n \neq 0} \frac{|\langle 0 | I_0 | n \rangle|^2}{E_{n0}} \delta(\omega), \end{aligned} \quad (2.28)$$

$$\text{Im}\{G(\omega)\} = P(2\hbar \sum_{n \neq 0} |\langle 0 | I_0 | n \rangle|^2 \frac{E_{n0}}{\hbar\omega} \frac{1}{E_{n0}^2 - (\hbar\omega)^2}), \quad (2.29)$$

onde P denota a parte principal e

$$\begin{aligned} I_0 &= -\frac{e}{\hbar} \frac{dH}{d\theta} \Big|_{\theta=0} \\ &= \frac{ie}{\hbar} V \sqrt{\frac{2}{N}} \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \sum_{m \text{ par}} \text{sen}(k_m a) (c_{k_m,\sigma}^\dagger c_{0,\sigma} - h.c.), \end{aligned} \quad (2.30)$$

onde devemos notar que apenas comparecem operadores $c_{k_m,\sigma}^\dagger$ vindos da banda desacoplada, assim o operador corrente I_0 destrói um elétron na ilha e cria outro na banda de condução desacoplada e vice-versa. Este fato terá consequências importantes como veremos na Seção 1.5.

A função $G(\omega)$ é a condutância no domínio da frequência e representa a razão entre as amplitudes da corrente elétrica e da força eletromotriz no caso de termos campo elétrico ao longo do anel com uma única componente na frequência, igual a ω .

Nesta dissertação vamos estudar o primeiro termo da parte real da condutância. O segundo termo, proporcional à função $\delta(\omega)$, só contribui (e é infinito) para frequência rigorosamente igual a zero. Tal termo é inevitável num sistema com dimensões finitas, já que a corrente elétrica não pode decair. À medida que o tamanho do anel vai aumentando, o coeficiente de proporcionalidade vai diminuindo segundo $\frac{1}{L}$, e assim para $L \rightarrow \infty$, este termo desaparece. Assim, é mais fácil considerar apenas o primeiro termo da expressão, o valor DC da condutância sendo tomado como o limite desta expressão quando $\omega \rightarrow 0$, como recomendado, por exemplo, por Mahan^[16].

II.4 Relação entre a condutância e a densidade espectral do nível de energia ϵ_d da ilha

Daqui para frente quando escrevermos $\text{Re}\{G(\omega)\}$, estaremos nos referindo ao segundo termo da parte real da condutância conforme escrito na equação (2.28) acima. Pois bem, vamos desenvolver esta expressão:

$$\begin{aligned} \text{Re}\{G(\omega)\} &= 2\pi\hbar \sum_{n \neq 0} |\langle 0 | I_0 | n \rangle|^2 \delta(E_{n0}^2 - (\hbar\omega)^2) \\ &= 2\pi \frac{e^2}{\hbar} V^2 \frac{2}{N} \sum_{n \neq 0} \left[\frac{\left| \langle 0 | \sum_{\substack{m \text{ par,} \\ \sigma=\uparrow, \downarrow}} \text{sen}(k_m a) (c_{k_m, \sigma}^\dagger c_{0, \sigma} - h.c.) | n \rangle \right|^2}{2|\hbar\omega|} \times \right. \\ &\quad \left. (\delta(\hbar\omega - E_{n0}) + \delta(\hbar\omega + E_{n0})) \right]. \end{aligned}$$

Para que os elementos de matriz acima sejam não nulos devemos ter a banda desacoplada excitada ou com um elétron acima do nível de Fermi ou com um buraco, ou seja deve ser um estado da forma

$$\begin{cases} |n_>\rangle \\ \text{ou} \\ |n_<\rangle \end{cases} = |n_a\rangle \otimes \begin{cases} c_{k_m}^\dagger |\emptyset_{desac.}\rangle, E(k_m) > 0 \\ \text{ou} \\ c_{k_m} |\emptyset_{desac.}\rangle, E(k_m) < 0 \end{cases}$$

Além disto se $|n\rangle$ for um destes estados, existe apenas uma combinação de valores (m, σ) para a qual o elemento de matriz não se anula. Assim podemos escrever

$$\begin{aligned} |\hbar\omega| \text{Re}\{G(\omega)\} &= \frac{\alpha^2}{2} \times \{ \\ &\sum_{\substack{E_m < 0, \\ n_a}} \text{sen}^2(k_m a) |\langle 0 | c_{0, \uparrow} | n_a \rangle|^2 [\delta(\hbar\omega + E_m - E_{n_a}) + \delta(\hbar\omega - E_m + E_{n_a})] + \\ &\sum_{\substack{E_m < 0, \\ n_a}} \text{sen}^2(k_m a) |\langle 0 | c_{0, \downarrow} | n_a \rangle|^2 [\delta(\hbar\omega + E_m - E_{n_a}) + \delta(\hbar\omega - E_m + E_{n_a})] + \\ &\sum_{\substack{E_m > 0, \\ n_a}} \text{sen}^2(k_m a) \left| \langle 0 | c_{0, \uparrow}^\dagger | n_a \rangle \right|^2 [\delta(\hbar\omega - E_m - E_{n_a}) + \delta(\hbar\omega + E_m + E_{n_a})] + \\ &\sum_{\substack{E_m > 0, \\ n_a}} \text{sen}^2(k_m a) \left| \langle 0 | c_{0, \downarrow}^\dagger | n_a \rangle \right|^2 [\delta(\hbar\omega - E_m - E_{n_a}) + \delta(\hbar\omega + E_m + E_{n_a})] \}, \quad (2.31) \end{aligned}$$

onde $\alpha^2 = 4\pi \frac{e^2}{\hbar} \frac{V^2}{N}$ e E_{n_a} é sempre positiva.

Lembrando que a densidade espectral do estado eletrônico na ilha é dada por

$$\rho_{0,\sigma}(\omega) = \begin{cases} \sum_{n_a} |\langle 0 | c_{0,\sigma} | n_a \rangle|^2 \delta(\hbar\omega - E_{n_a}), & \omega > 0, \\ \sum_{n_a} |\langle 0 | c_{0,\sigma}^\dagger | n_a \rangle|^2 \delta(\hbar\omega + E_{n_a}), & \omega < 0, \end{cases}, \quad (2.32)$$

temos que

$$\rho_{0,\sigma}(-\omega) = \begin{cases} \sum_{n_a} |\langle 0 | c_{0,\sigma} | n_a \rangle|^2 \delta(\hbar\omega + E_{n_a}), & \omega < 0, \\ \sum_{n_a} |\langle 0 | c_{0,\sigma}^\dagger | n_a \rangle|^2 \delta(\hbar\omega - E_{n_a}), & \omega > 0. \end{cases} \quad (2.33)$$

Vamos, então, reescrever cada uma das somas anteriores em função da densidade espectral.

1- Primeira soma:

Para cada $E_m < 0$, podemos ter:

$$\text{a) } \hbar\omega < E_m \Rightarrow \hbar\omega < 0 \Rightarrow \hbar\omega + E_m - E_{n_a} < 0 \Rightarrow$$

$$\delta(\hbar\omega + E_m - E_{n_a}) = 0;$$

$$\text{b) } E_m < \hbar\omega < -E_m \Rightarrow$$

$$\delta(\hbar\omega + E_m - E_{n_a}) = 0 \text{ e } \delta(\hbar\omega - E_m + E_{n_a}) = 0;$$

$$\text{c) } \hbar\omega > -E_m \Rightarrow \hbar\omega > 0 \Rightarrow \hbar\omega - E_m + E_{n_a} > 0 \Rightarrow$$

$$\delta(\hbar\omega + E_m - E_{n_a}) = 0.$$

Portanto, para a primeira soma do lado direito da Eq. 2.31, temos

$$\begin{aligned} & \text{Primeira soma} = \\ & \sum_{E_m < 0} \text{sen}^2(k_m a) \times \begin{cases} \rho_{0,\uparrow}(-\hbar\omega + E_m), & \hbar\omega < E_m < 0; \\ 0, & E_m < \hbar\omega < -E_m; \\ \rho_{0,\uparrow}(\hbar\omega + E_m), & \hbar\omega > -E_m > 0. \end{cases} \end{aligned}$$

$$\text{Primeira soma} = \sum_{E_m < 0} \text{sen}^2(k_m a) \times \begin{cases} \rho_{0,\uparrow}(|\hbar\omega| + E_m), & |\hbar\omega| > -E_m \\ 0, & |\hbar\omega| < -E_m \end{cases}$$

2- A segunda soma é igual à primeira, uma vez que $\rho_{0,\uparrow} = \rho_{0,\downarrow}$.

3- Para o terceiro termo à direita na Eq. 2.31:

para cada $E_m < 0$, podemos ter:

$$\text{a)} \hbar\omega < -E_m \Rightarrow \hbar\omega < 0 \Rightarrow \hbar\omega - E_m - E_{n_a} < 0 \Rightarrow$$

$$\delta(\hbar\omega - E_m - E_{n_a}) = 0;$$

$$\text{b)} -E_m < \hbar\omega < E_m \Rightarrow$$

$$\delta(\hbar\omega - E_m - E_{n_a}) = 0 \text{ e } \delta(\hbar\omega + E_m + E_{n_a}) = 0;$$

$$\text{c)} \hbar\omega > E_m \Rightarrow \hbar\omega > 0 \Rightarrow \hbar\omega + E_m + E_{n_a} > 0 \Rightarrow$$

$$\delta(\hbar\omega + E_m + E_{n_a}) = 0.$$

Assim,

Terceira soma =

$$\sum_{E_m > 0} \text{sen}^2(k_m a) \times \begin{cases} \rho_{0,\uparrow}(\hbar\omega + E_m), \hbar\omega < -E_m < 0; \\ 0, E_m < \hbar\omega < -E_m; \\ \rho_{0,\uparrow}(-\hbar\omega + E_m), \hbar\omega > E_m > 0. \end{cases},$$

$$\text{Terceira soma} = \sum_{E_m < 0} \text{sen}^2(k_m a) \times \begin{cases} \rho_{0,\uparrow}(-|\hbar\omega| + E_m), |\hbar\omega| > E_m \\ 0, |\hbar\omega| < E_m \end{cases}$$

4- O quarto termo é igual ao terceiro, já que $\rho_{0,\uparrow} = \rho_{0,\downarrow}$.

Assim, para $\hbar\omega < 0$:

$$|\hbar\omega| \text{Re}\{G(\omega)\} = \alpha^2 \times \left\{ \sum_{\hbar\omega < E_m < 0} \text{sen}^2(k_m a) \rho_{0,\uparrow}(|\hbar\omega| + E_m) + \sum_{0 < E_m < -\hbar\omega} \text{sen}^2(k_m a) \rho_{0,\uparrow}(-|\hbar\omega| + E_m) \right\}.$$

E para $\hbar\omega > 0$:

$$|\hbar\omega| \text{Re}\{G(\omega)\} = \alpha^2 \times \left\{ \sum_{-\hbar\omega < E_m < 0} \text{sen}^2(k_m a) \rho_{0,\uparrow}(|\hbar\omega| + E_m) + \sum_{0 < E_m < \hbar\omega} \text{sen}^2(k_m a) \rho_{0,\uparrow}(-|\hbar\omega| + E_m) \right\}$$

Então, em geral, temos

$$|\hbar\omega| \text{Re}\{G(\omega)\} = \alpha^2 \times \{$$

$$\begin{aligned}
& \sum_{-|\hbar\omega| < E_m < 0} \text{sen}^2(k_m a) \rho_{0,\uparrow}(|\hbar\omega| + E_m) + \\
& \sum_{0 < E_m < |\hbar\omega|} \text{sen}^2(k_m a) \rho_{0,\uparrow}(-|\hbar\omega| + E_m) \}.
\end{aligned} \tag{2.34}$$

Se trocarmos as somas sobre k_m por integrais na energia, lembrando que $k_m a = \frac{m\pi}{N}$, com m par e que $E_m = 2t \cos(k_m a)$, teremos

$$\begin{aligned}
\text{Re}\{G(\omega)\} &= \frac{e^2}{\hbar} \frac{V^2}{t |\hbar\omega|} \times \\
& \int_0^{|\hbar\omega|} \sqrt{1 - \left(\frac{E}{2t}\right)^2} [\rho_{0,\uparrow}(-|\hbar\omega| + E) + \rho_{0,\uparrow}(|\hbar\omega| - E)] dE .
\end{aligned} \tag{2.35}$$

Podemos tomar o limite $|\hbar\omega| \rightarrow 0$, para obter finalmente

$$\lim_{\omega \rightarrow 0} \text{Re}\{G(\omega)\} = 2 \frac{e^2}{\hbar} \frac{V^2}{t} \rho_{0,\uparrow}(0) \tag{2.36}$$

Capítulo III

Nosso problema abordado pelo Grupo de Renormalização Numérico

As teorias de renormalização surgiram na Eletrodinâmica Quântica para eliminar divergências espúrias. Estas divergências aparecem essencialmente quando muitas escalas de energia (um número infinito delas) contribuem para o cálculo de alguma grandeza física, ou, ainda mais, quando estas várias escalas formam a física do problema. A teoria do grupo de renormalização é uma ferramenta desenvolvida para se lidar com este tipo de problema, isto é, um problema caracterizado pela presença simultânea de muitas escalas ou de energia ou de distância ou de tempo, que, na verdade, não é incomum e pode ser encontrado em diferentes áreas da física. Podemos citar, por exemplo, o problema Kondo (sobre o qual já comentamos na Introdução) em Estado Sólido, fenômenos críticos em Física Estatística, turbulência em Hidrodinâmica, ligações moleculares em moléculas grandes em Química Quântica e em problemas de Eletrodinâmica Quântica e Teoria Quântica de Campos. O problema é comum, mas sua solução está longe de ser simples e isto quando se consegue encontrá-la.

A idéia básica do grupo de renormalização é que estas várias escalas estão acopladas localmente, isto é, uma determinada escala de energia, por exemplo, influencia diretamente de modo significativo apenas a escala imediatamente inferior e a escala imediatamente superior, de modo que visualizamos o sistema em uma forma de cascata.

Em geral a teoria do grupo de renormalização apresenta formulações diagramáticas que, segundo Wilson, escondem a física das várias escalas, e neste aspecto o Grupo de Renormalização

Numérico se insere, ao menos, com grande potencial, pois é um método não perturbativo em que toda esta física de várias escalas aparece explicitamente. Nas palavras do próprio Wilson^[4]: “Este é o mais excitante aspecto do grupo de renormalização, a parte da teoria que torna possível resolver problemas que são intratáveis por diagramas de Feynman”.

Para se aplicar o GRN a um problema é necessário, portanto, isolar as diferentes escalas presentes no mesmo e então ver como elas se conectam às escalas vizinhas. Este é o ponto chave, pois em geral, apesar de sabermos que existem as várias escalas, conseguir isolá-las e acoplá-las localmente não é uma tarefa para a qual se tenha um caminho direto a ser percorrido, para cada problema este caminho deve ser descoberto.

Neste capítulo, seguiremos, na análise de nosso problema, o método que Wilson originalmente utilizou para resolver o problema Kondo. À medida que formos dando seguimento a esta análise os pontos mencionados acima se tornarão mais claros, ao mesmo tempo que alguns outros conceitos característicos do grupo de renormalização serão introduzidos. Estaremos seguindo de perto as Ref. [6] e [7].

III.1 Discretização logarítmica da banda de condução

Como discutido no capítulo anterior, o modelo que descreve nosso sistema tem o seguinte Hamiltoniano

$$H = H_a + H_d \quad (3.1)$$

onde

$$\begin{aligned} H_a = & \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \sum_{m \text{ ímpar}} \left(\varepsilon(k_m) c_{k_m,\sigma}^\dagger c_{k_m,\sigma} \right) + \\ & \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \sum_{m \text{ ímpar}} 2V \sqrt{\frac{2}{N_s}} \sin(k_m a) \left(c_{k_m,\sigma}^\dagger c_{0,\sigma} + h.c. \right) + \\ & \epsilon_d c_{0,\sigma}^\dagger c_{0,\sigma} + U n_\uparrow n_\downarrow, \text{ e} \end{aligned} \quad (3.2)$$

$$H_d = \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \sum_{m \text{ par}} \varepsilon(k_m) c_{k_m,\sigma}^\dagger c_{k_m,\sigma}. \quad (3.3)$$

E as energias $\varepsilon(k_m) = 2t \cos(k_m a)$, $k_m a = \frac{m\pi}{N_s}$, $m = 1, 2, \dots, N_s - 1$, $N_s = \frac{L}{a}$ = número de sítios no anel.

Figura III-1: Em unidades de D , a banda de condução é subdividida em subintervalos simétricos em torno da origem. Estes intervalos, salvo aqueles no topo ou no fundo da banda de condução, são tais que seus comprimentos formam uma progressão geométrica de razão Λ^{-1} . Variando-se o parâmetro z , estes subintervalos são reposicionados no eixo das energias.

Temos portanto o Hamiltoniano do modelo de Anderson mais uma banda de condução livre. As excitações podem ir desde energias da ordem de $\frac{1}{L}$, onde L é o comprimento do anel, até energias da ordem de $D = 2t$, que é a meia largura das bandas de condução acima. Neste intervalo temos várias escalas de energia, e na aproximação onde $L \rightarrow \infty$, teremos um número infinito delas. Daqui para frente consideraremos as energias em unidades da meia largura D . Para separá-las explicitamente, Wilson propôs que a banda de condução, agora um segmento de reta com extremos em -1 e 1 , fosse subdividida em escala logarítmica. Para tanto dispôs de um parâmetro, Λ , maior que 1 , e considerou os subintervalos $[\Lambda^{-1}, 1]$, $[\Lambda^{-2}, \Lambda^{-1}]$, $[\Lambda^{-3}, \Lambda^{-2}]$, ..., $[-1, -\Lambda^{-1}]$, $[-\Lambda^{-1}, -\Lambda^{-2}]$, $[-\Lambda^{-2}, -\Lambda^{-3}]$, ... Como veremos, os resultados numéricos encontrados através do GRN aproximam-se dos valores exatos no limite $\Lambda \rightarrow 1$, mas para valores deste parâmetro como 2.5 ou 3.0 os resultados numéricos já são bastante satisfatórios a depender da propriedade que se esteja calculando. O problema é que o custo computacional com estes valores para Λ pode tornar-se proibitivo e então lançamos mão de um novo parâmetro^[20], z , assumindo valores em um dos intervalos da forma $[x, x + 1]$, $x > 0$, e consideramos nossa banda subdividida conforme a Fig. 1 (banda subdividida). Devido à introdução desse parâmetro, poderemos trabalhar com maiores valores para Λ , como 10 no presente trabalho. Variando-se z podemos reposicionar os intervalos na banda de condução e assim diagonalizar nosso Hamiltoniano partindo de diferentes subdivisões. Uma integração em z dos vários resultados encontrados nos permitirá recuperar o contínuo.

Quando fazemos $L \rightarrow \infty$, nosso Hamiltoniano deve ser reescrito na forma

$$H_a = \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \int_0^{\frac{\pi}{a}} 2t \cos(ka) C_{k,\sigma,a}^\dagger C_{k,\sigma,a} dk +$$

$$\begin{aligned}
& \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \int_0^{\frac{\pi}{a}} 2V \sqrt{\frac{a}{\pi}} \text{sen}(ka) [C_{k,\sigma,a}^\dagger c_{0,\sigma} + c_{0,\sigma}^\dagger C_{k,\sigma,a}] dk + \\
& \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \epsilon_d c_{0,\sigma}^\dagger c_{o,\sigma} + U n_\uparrow n_\downarrow
\end{aligned} \tag{3.4}$$

$$H_d = \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \int_0^{\frac{\pi}{a}} 2t \cos(ka) C_{k,\sigma,a}^\dagger C_{k,\sigma,a} dk \tag{3.5}$$

onde os operadores satisfazem as seguintes relações de anticomutação

$$\{C_{k,\sigma,n}, C_{k',\sigma',n'}^\dagger\} = \delta(k - k') \delta_{\sigma,\sigma'} \delta_{n,n'} ; \tag{3.6}$$

$$\{C_{k,\sigma,n}, C_{k',\sigma',n'}\} = \{C_{k,\sigma,n}, c_{0,\sigma'}\} = \{C_{k,\sigma,n}, c_{0,\sigma'}^\dagger\} = 0. \tag{3.7}$$

E se fizermos uma nova transformação com o objetivo de indexar os estados da banda de condução não pela variável k , mas por ξ , a energia em unidades de D :

$$C_{\xi,\sigma,\mu}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{a \text{sen}(ka)}} C_{k,\sigma,\mu}^\dagger, \tag{3.8}$$

teremos nosso Hamiltoniano escrito na seguinte forma

$$\begin{aligned}
H_a = & D \left[\sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \int_{-1}^1 \xi C_{\xi,\sigma,a}^\dagger C_{\xi,\sigma,a} d\xi + \right. \\
& \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \int_{-1}^1 \sqrt{\frac{\Gamma(\xi)}{\pi D}} [C_{\xi,\sigma,a}^\dagger c_{0,\sigma} + c_{0,\sigma}^\dagger C_{\xi,\sigma,a}] d\xi + \\
& \left. \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \frac{\epsilon_d}{D} c_{0,\sigma}^\dagger c_{o,\sigma} + \frac{U}{D} n_\uparrow n_\downarrow \right],
\end{aligned} \tag{3.9}$$

$$H_d = D \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \int_{-1}^1 \xi C_{\xi,\sigma,a}^\dagger C_{\xi,\sigma,a} d\xi, \tag{3.10}$$

onde

$$\Gamma(\xi) \equiv \pi \rho(\xi) V^2(\xi) = 2 \left(\frac{V}{t} \right) \sqrt{(1 - \xi^2)} V, \tag{3.11}$$

$$\rho(\xi) = \frac{L}{2\pi} \frac{1}{2t a \text{sen}(ka)} = \frac{N_s}{4\pi t \sqrt{(1 - \xi^2)}} \tag{3.12}$$

e

$$V(\xi) = 2V \sqrt{\frac{2}{N}} \text{sen}(ka) = 2V \sqrt{\frac{2}{N_s}} (1 - \xi^2). \quad (3.13)$$

Agora vamos considerar os sub-intervalos em que dividimos a banda de condução (Fig. 1)

$$I_n^+ = \begin{cases} (\Lambda^{-z}, 1), & n = 0 \\ (\Lambda^{-n-z-1}, \Lambda^{-n-z}), & n = 1, 2, 3, \dots \end{cases}$$

$$I_n^- = \begin{cases} (-1, -\Lambda^{-z}), & n = 0 \\ (-\Lambda^{-n-z}, -\Lambda^{-n-z-1}), & n = 1, 2, 3, \dots \end{cases}$$

e definir em cada um deles uma base de Fourier

$$\langle \xi | \Psi_{n,p}^+ \rangle = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{L_n}} e^{i\omega_n p \xi}, & \xi \in I_n^+ \\ 0, & \xi \notin I_n^+ \end{cases}$$

$$\langle \xi | \Psi_{n,p}^- \rangle = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{L_n}} e^{-i\omega_n p \xi}, & \xi \in I_n^- \\ 0, & \xi \notin I_n^- \end{cases}$$

onde L_n = tamanho de $I_n^{+(-)}$, $\omega_n = \frac{2\pi}{L_n}$, $p \in \mathbf{Z}$ e $|\xi\rangle$ é o equivalente neste espaço descrito pela variável ξ ao ket $|x\rangle$ no espaço das posições.

Definindo os operadores

$$a_{n,p}^\dagger |\emptyset\rangle \equiv |\Psi_{n,p}^+\rangle \quad (3.14)$$

$$b_{n,p}^\dagger |\emptyset\rangle \equiv |\Psi_{n,p}^-\rangle \quad (3.15)$$

os Hamiltonianos acoplado e desacoplado podem ser escritos em termos deles. É, no entanto, uma boa aproximação considerar apenas os termos com $p = 0$, que são os mais acoplados à ilha (Ref. [6]). Assim, dentro desta aproximação, teremos

$$H_d = D \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \sum_{n=0}^{\infty} E_n (a_{n,\sigma,d}^\dagger a_{n,\sigma,d} - b_{n,\sigma,d}^\dagger b_{n,\sigma,d}) \quad (3.16)$$

$$H_a = D \left[\sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \sum_{n=0}^{\infty} E_n (a_{n,\sigma,a}^\dagger a_{n,\sigma,a} - b_{n,\sigma,a}^\dagger b_{n,\sigma,a}) + \right. \\ \left. \sqrt{\frac{\Gamma(0)}{\pi t}} N_0 \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} f_{0,\sigma,a}^\dagger c_{0,\sigma} + c_{0,\sigma}^\dagger f_{0,\sigma,a} + \right.$$

$$\sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \epsilon_d c_{0,\sigma}^\dagger c_{o,\sigma} + U n_{\uparrow} n_{\downarrow} \quad (3.17)$$

onde

$$E_n = \begin{cases} \frac{1+\Lambda^{-z}}{2}, & n = 0 \\ \frac{1+\Lambda^{-1}}{2} \Lambda^{-n-z+1}, & n \neq 0 \end{cases} \quad (3.18)$$

é valor médio do subintervalo I_n^+ e o operador $f_{0,\sigma,a}^\dagger$ é definido por

$$f_{0,\sigma,a}^\dagger \equiv \frac{1}{N_0} \sum_{n=0}^{\infty} \left[\int_{I_n^+} \frac{(1-\xi^2)^{\frac{1}{4}}}{\sqrt{2L_n}} d\xi \right] (a_{n,\sigma,a}^\dagger + b_{n,\sigma,a}^\dagger), \quad (3.19)$$

sendo N_0 uma constante de normalização, ou seja definida de tal forma que $\{f_{0,\sigma,a}, f_{0,\sigma,a}^\dagger\} = 1$.

Assim conseguimos isolar as diferentes escalas de energia de nosso problema, onde passamos a ter um Hamiltoniano composto de uma soma de diversos termos cada um representando um escala de energia diferente. É esta a discretização logarítmica.

A aproximação de abandonar os termos com $p \neq 0$, seria facilmente aceitável para Λ próximo de 1, pois neste caso, as “frequências” $\omega_n = \frac{2\pi}{L_n}$ ficam muito maiores que 1 e o produto escalar de um ket genérico $|\phi\rangle$ com um estado $|\Psi_{n,p \neq 0}^{+(-)}\rangle$ tenderia a ser nulo, de modo que qualquer função de onda neste espaço da variável ξ seria descrita como combinação linear apenas dos kets $|\Psi_{n,p=0}^{+(-)}\rangle$, e haveria um contínuo destes estados. Assim estaríamos recuperando o contínuo. Para valores maiores de Λ , como 2.5 ou 3 é normalmente verificado *a posteriori* que esta é uma boa aproximação. Conforme já discutimos, a utilização do parâmetro z nos permitirá utilizar valores tão grandes quanto 10, por exemplo, o que diminui sensivelmente o custo computacional de nossa empreitada.

Seguindo a idéia central do grupo de renormalização é necessário acoplarmos cada escala de energia com as escalas vizinhas e este acoplamento não está visível no Hamiltoniano escrito acima.

III.2 Tridiagonalização da banda de condução

Para conseguirmos explicitar os acoplamentos locais entre as diversas escalas de energia é necessário uma transformação no Hamiltoniano. Podemos lembrar de uma situação oposta encontrada no capítulo anterior, onde tínhamos um Hamiltoniano tight-binding de primeiros

vizinhos e então o diagonalizávamos. O que faremos agora é mudar a base de operadores de $\{a_n, b_n\}$ para uma outra em que o Hamiltoniano seja tight-binding de primeiros vizinhos, onde vizinho no atual contexto não significa separado por uma determinada distância, mas sim, separado por uma diferença na escala de energia, uma vez que estamos no espaço da variável ξ . Essa transformação é conhecida por transformação de Lanczos. O primeiro estado desta nova base já é conhecido, é o operador $f_{0,\sigma,n}$, que responde por todo o acoplamento da banda de condução à ilha no caso da banda acoplada ($n = a$). Resta-nos determinar os demais de tal forma que a parte equivalente à banda de condução de H_a ou o próprio H_d acima possam ser escritos da seguinte forma

$$\frac{H_{banda}}{D} = \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \sum_{n=0}^{\infty} \epsilon_n^z (f_{n,\sigma}^\dagger f_{n+1,\sigma} + h.c.). \quad (3.20)$$

Nesta forma o Hamiltoniano está no formato tridiagonal e o procedimento para determinarmos os coeficientes ϵ_n^z e os operadores $f_{n,\sigma}^\dagger$ é o que chamamos de tridiagonalização da banda de condução. Este procedimento está descrito no Apêndice B. Aqui apenas adiantaremos que os coeficientes ϵ_n^z aproximam-se assintoticamente da expressão $\frac{1+\Lambda^{-1}}{2} \Lambda^{1-z-n/2}$ para $n \gg 1$. Para um cálculo numérico é necessário truncarmos a série acima. Se este truncamento é feito em $n = N - 1$, definem-se os Hamiltonianos truncados e adimensionais

$$H_{d,N} = \frac{H_{d,truncado}}{D(\frac{1+\Lambda^{-1}}{2})} \Lambda^{\frac{N-1}{2}} = \Lambda^{\frac{N-1}{2}} \left[\sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \sum_{n=0}^{N-1} \Lambda^{\frac{-n}{2}} \xi_n^z (f_{n,\sigma,d}^\dagger f_{n+1,\sigma,d} + h.c.) \right], \quad (3.21)$$

$$H_{a,N} = \frac{H_{a,truncado}}{D(\frac{1+\Lambda^{-1}}{2})} \Lambda^{\frac{N-1}{2}} = \Lambda^{\frac{N-1}{2}} \left[\sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \sum_{n=0}^{N-1} \Lambda^{\frac{-n}{2}} \xi_n^z (f_{n,\sigma,a}^\dagger f_{n+1,\sigma,a} + h.c.) + \right. \\ \left. (\Gamma^*)^{\frac{1}{2}} \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} (f_{0,\sigma,a}^\dagger c_{0,\sigma} + c_{0,\sigma}^\dagger f_{0,\sigma,a}) + \epsilon_d^* \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} c_{0,\sigma}^\dagger c_{0,\sigma} + U^* n_\uparrow n_\downarrow \right], \quad (3.22)$$

onde foram tomadas as seguintes definições:

$$\xi_n^z \equiv \frac{2}{1 + \Lambda^{-1}} \Lambda^{n/2} \epsilon_n^z, \quad (3.23)$$

$$\Gamma^* \equiv \left(\frac{2N_0}{1 + \Lambda^{-1}} \right)^2 \frac{\Gamma(0)}{\pi t}, \quad (3.24)$$

$$\epsilon_d^* \equiv \frac{\epsilon_d}{t(1 + \Lambda^{-1})}, \quad (3.25)$$

$$U^* \equiv \frac{U}{t(1 + \Lambda^{-1})}. \quad (3.26)$$

O fator $\Lambda^{\frac{N-1}{2}}$ multiplicando os Hamiltonianos serve para seus menores autovalores serem da ordem da unidade.

Estes Hamiltonianos satisfazem a seguinte relação de recorrência

$$H_{N+1} = \Lambda^{\frac{1}{2}} H_N + \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \xi_N^z (f_{N,\sigma}^\dagger f_{N+1,\sigma} + h.c.), \quad (3.27)$$

que é a peça chave para o procedimento de diagonalização iterativa em que se baseia o GRN. É através dela que nós vamos percorrer a cascata de diferentes escalas de energia. Partindo de energias altas com um Hamiltoniano truncado em um valor pequeno de N , vamos incorporando novos termos a este Hamiltoniano, isto é, analisando sucessivamente os Hamiltonianos truncados em $N + 1$, $N + 2$, $N + 3 \dots$ e, assim, vamos introduzindo escalas de energia cada vez menores.

III.3 Diagonalização iterativa

Vamos aqui descrever sucintamente o procedimento de diagonalização iterativa. Para detalhes deve-se consultar a Ref. [6].

Suponha que o Hamiltoniano H_N está diagonalizado e se quer diagonalizar H_{N+1} . Combinando cada autovetor de H_N com os quatro estados do “orbital” $N + 1$ (vazio, ocupado por um elétron com spin $\uparrow$, ocupado por um elétron com spin $\downarrow$ ou duplamente ocupado), teremos uma base na qual escrevemos a matriz correspondente à H_{N+1} , que é, então, diagonalizada. Essencialmente é este o procedimento porém, imediatamente nos damos conta do aumento exponencial no número de estados (4^{N+2} na iteração N) e vemos que é impossível trabalharmos com todos eles, surgindo a necessidade de eliminarmos alguns (na verdade a maioria). Esta eliminação é feita estabelecendo uma energia de corte e, a cada iteração, descartando os autovetores com energia maior do que ela. Assim a cada iteração é retida a parte inferior do espectro. Para não precisarmos mudar o valor da energia de corte, a cada iteração subtraímos das energias encontradas o valor da energia do estado fundamental naquela iteração, de modo que as nossas energias são sempre relativas ao estado fundamental.

Com o estabelecimento da energia de corte viabilizamos computacionalmente a diagonalização iterativa, porém podemos facilitá-la enormemente se tirarmos proveito das simetrias do Hamiltoniano, identificando operadores que comutem com ele. No nosso caso, tiramos proveito de três operadores:

$$\text{Carga: } Q_N = \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \sum_{n=0}^{N-1} (f_{0,\sigma}^\dagger f_{0,\sigma} - \frac{1}{2}) + \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} (c_{0,\sigma}^\dagger c_{0,\sigma} - \frac{1}{2}) \quad (3.28)$$

$$\text{Componente z do spin total: } S_{z_N} = \frac{1}{2} \left[\sum_{n=0}^{N-1} f_{0,\uparrow}^\dagger f_{0,\uparrow} - \sum_{n=0}^{N-1} f_{0,\downarrow}^\dagger f_{0,\downarrow} \right] \quad (3.29)$$

$$\text{Spin total ao quadrado: } S_N^2 = \text{ver Apêndice C} \quad (3.30)$$

As parcelas $-\frac{1}{2}$ no operador Q_N servem apenas para deixar os autovalores simétricos em relação à origem.

Para tirarmos proveito dessas simetrias operacionalmente, ao montarmos a base na qual escreveremos H_{N+1} , não a fazemos conforme estabelecido acima, mas sim procurando combinar os autovetores de H_N com os possíveis estados do orbital $N+1$ de maneira que a base já seja composta de autovetores de Q_{N+1} , $S_{z_{N+1}}$, S_{N+1}^2 . Desta forma só precisaremos calcular elementos de matriz de H_{N+1} entre vetores da base com os mesmos valores para estes três números quânticos.

Representamos um autovetor de H_N com carga Q , spin total S e componente z do spin S_z por $|Q, S, S_z, r\rangle_N$, onde o índice r apenas enumera os autovetores de H_N no subespaço (Q, S, S_z) em ordem crescente de energia.

Se na etapa N há o subespaço (Q, S, S_z) , então na etapa $N+1$ não haverá este subespaço, pois se adicionarmos um elétron ao orbital f_{N+1} (eu estou fazendo um abuso de notação, f_{N+1} é um operador), a carga permanece a mesma mas o valor de S mudará de uma unidade. Por outro lado, se não adicionarmos elétron nenhum ao novo orbital, a carga diminuirá de uma unidade e se acrescentarmos 2 elétrons, a carga aumentará de uma unidade.

Pois bem, se na etapa $N+1$ for possível construirmos o subespaço (Q, S, S_z) , vamos ver como fazê-lo a partir dos autovetores de H_N , Q_N , S_N^2 e S_{z_N} .

Havendo na etapa N o subespaço $(Q+1, S, S_z)$, cada um de seus estados combinados com

o orbital f_{N+1} vazio resultará em um estado desejado:

$$|Q, S, S_z, r; 1\rangle_{N+1} = |Q + 1, S, S_z, r\rangle_N, \quad (3.31)$$

onde o índice 1 indica que este estado foi construído a partir do subespaço $(Q + 1, S)$ da etapa N .

Havendo na etapa N o subespaço $(Q - 1, S, S_z)$, cada um de seus estados combinados com o orbital f_{N+1} duplamente ocupado resultará em um desejado:

$$|Q, S, S_z, r, 4\rangle_{N+1} = f_{N+1,\uparrow}^\dagger f_{N+1,\downarrow}^\dagger |Q - 1, S, S_z, r\rangle_N, \quad (3.32)$$

onde o índice 4 indica que este estado foi construído a partir do subespaço $(Q - 1, S)$ da etapa N .

Havendo na etapa N o subespaço $(Q, S - 1/2)$, ao fazermos a soma dos momenta angulares $S - \frac{1}{2}$ e $\frac{1}{2}$ (estes últimos vindo do subespaço $\{f_{N+1,\uparrow}^\dagger |\phi\rangle, f_{N+1,\downarrow}^\dagger |\phi\rangle\}$) encontraremos novos estados desejados:

$$\begin{aligned} |Q, S, S_z, r, 2\rangle_{N+1} = & \sqrt{\frac{S + S_z}{2S}} f_{N+1,\uparrow}^\dagger |Q, S - 1/2, S_z - 1/2, r\rangle_N + \\ & \sqrt{\frac{S - S_z}{2S}} f_{N+1,\downarrow}^\dagger |Q, S - 1/2, S_z + 1/2, r\rangle_N \end{aligned} \quad (3.33)$$

onde o índice 2 indica que este estado foi construído a partir do subespaço $(Q, S - 1/2)$ da etapa N .

Finalmente havendo na etapa N o subespaço $(Q, S + 1/2)$, ao fazermos a soma dos momenta angulares $S + \frac{1}{2}$ e $\frac{1}{2}$, encontraremos os estados desejados:

$$\begin{aligned} |Q, S, S_z, r, 3\rangle_{N+1} = & -\sqrt{\frac{S - S_z + 1}{2S + 2}} f_{N+1,\uparrow}^\dagger |Q, S + 1/2, S_z - 1/2, r\rangle_N + \\ & \sqrt{\frac{S + S_z + 1}{2S + 2}} f_{N+1,\downarrow}^\dagger |Q, S + 1/2, S_z + 1/2, r\rangle_N \end{aligned} \quad (3.34)$$

onde o índice 3 indica que este estado foi construído a partir do subespaço $(Q, S + 1/2)$ da etapa N .

Estes estados formam a base na qual escreveremos a matriz de H_{N+1} . Para tanto precisamos

Figura III-2: À medida que as iterações vão aumentando, o conjunto de possíveis subespaços (carga, spin total) vai se alternando, ora correspondendo aos quadros brancos de um tabuleiro de xadrez, ora aos quadros pretos. Para montarmos um subespaço presente na iteração $N+1$, um quadro preto por exemplo, partimos dos estados presentes nos quadros brancos a norte, sul, leste e oeste daquele quadro, correspondentes a subespaços presentes na iteração N .

calcular os elementos do Hamiltoniano nos vários subespaços (Q, S, S_z) . Outro ponto importante é que os elementos de matriz de H_{N+1} dentro de um subespaço (Q, S, S_z) não dependem de S_z , conforme podemos verificar imediatamente:

$$\begin{aligned}
 \langle Q, S, S_z + 1, r; j | H_{N+1} | Q, S, S_z + 1, r'; j' \rangle &= \\
 \frac{1}{\hbar^2(S(S+1) - S_z(S_z+1))} \langle Q, S, S_z, r; j | S_{N+1}^- H_{N+1} S_{N+1}^+ | Q, S, S_z, r'; j' \rangle &= \\
 \frac{1}{\hbar^2(S(S+1) - S_z(S_z+1))} \langle Q, S, S_z, r; j | H_{N+1} S_{N+1}^- S_{N+1}^+ | Q, S, S_z, r'; j' \rangle &= \\
 \frac{1}{\hbar^2(S(S+1) - S_z(S_z+1))} \langle Q, S, S_z, r; j | H_{N+1} (S_{N+1}^2 - S_{zN+1}^2 - \hbar S_{zN+1}) | Q, S, S_z, r'; j' \rangle &= \\
 \langle Q, S, S_z, r; j | H_{N+1} | Q, S, S_z, r'; j' \rangle
 \end{aligned}$$

Assim não precisamos levar em conta o número quântico S_z durante todo o processo de diagonalização; apenas no final, quando formos calcular alguma propriedade envolvendo soma de estados, devemos lembrar que a cada valor S estão associados $2S + 1$ autoestados. A Fig. 2 ilustra os vários subespaços dispostos em eixos coordenados. Se um dado ponto $(Q, 2S)$ representa um possível subespaço na iteração $N+1$, então formaremos uma base para ele a partir dos estados presentes nos subespaços da iteração N representados pelos pontos a Norte (1), Oeste(2), Leste(3) e Sul(4) do mesmo.

Resta-nos apenas calcular os elementos de matriz da forma

$$\begin{aligned}
& {}_{N+1} \langle Q, S, S_z, R; j | H_{N+1} | Q, S, S_z, R'; j' \rangle_{N+1} \\
& = {}_{N+1} \langle Q, S, S_z, R; j | \Lambda^{\frac{1}{2}} H_N + \\
& \quad \sum_{\sigma=\uparrow, \downarrow} \xi_N^z (f_{N,\sigma}^\dagger f_{N+1,\sigma} + h.c.) | Q, S, S_z, R'; j' \rangle_{N+1}
\end{aligned} \tag{3.35}$$

A parte de H_N é imediata:

${}_{N+1} \langle Q, S, S_z, R; j | H_{N+1} | Q, S, S_z, R'; j' \rangle_{N+1} = \delta_{R,R'} \delta_{j,j'} E_N$, onde

$$E_N = \begin{cases} \text{Energia na iteração } N \text{ de } |Q+1, S, R\rangle, \text{ se } j=1 \\ \text{Energia na iteração } N \text{ de } |Q, S-\frac{1}{2}, R\rangle, \text{ se } j=2 \\ \text{Energia na iteração } N \text{ de } |Q, S+\frac{1}{2}, R\rangle, \text{ se } j=3 \\ \text{Energia na iteração } N \text{ de } |Q-1, S, R\rangle, \text{ se } j=4. \end{cases}$$

A outra parte, ${}_{N+1} \langle Q, S, S_z, r; j | \sum_{\sigma=\uparrow, \downarrow} \xi_N^z (f_{N,\sigma}^\dagger f_{N+1,\sigma} + h.c.) | Q, S, S_z, r'; j' \rangle_{N+1}$, é mais trabalhosa. Primeiro, notemos que só existem os elementos de matriz para

$$\begin{aligned}
j &= 1 \text{ e } j' = 2 \text{ ou vice-versa,} \\
j &= 1 \text{ e } j' = 3 \text{ ou vice-versa,} \\
j &= 2 \text{ e } j' = 4 \text{ ou vice-versa,} \\
j &= 3 \text{ e } j' = 4 \text{ ou vice-versa.}
\end{aligned}$$

depois, notemos que

$$\begin{aligned}
& {}_{N+1} \langle Q, S, S_z, R; j | \sum_{\sigma=\uparrow, \downarrow} \xi_N^z (f_{N,\sigma}^\dagger f_{N+1,\sigma} + h.c.) | Q, S, S_z, R'; j' \rangle_{N+1} \\
& = {}_{N+1} \langle Q, S, S_z, R'; j' | \sum_{\sigma=\uparrow, \downarrow} \xi_N^z (f_{N,\sigma}^\dagger f_{N+1,\sigma} + h.c.) | Q, S, S_z, R; j \rangle_{N+1}
\end{aligned}$$

de modo que não precisamos tratar os “vice-versa”.

Aqui vamos calcular apenas o caso $j=1$ e $j'=2$ sendo os demais casos análogos a este.

$${}_{N+1} \langle Q, S, S_z, R; 1 | \sum_{\sigma=\uparrow, \downarrow} \xi_N^z (f_{N,\sigma}^\dagger f_{N+1,\sigma} + h.c.) | Q, S, S_z, R'; 2 \rangle_{N+1}$$

$$\begin{aligned}
&= \left(\frac{S + S_z}{2S} \right)_N^{\frac{1}{2}} \langle Q + 1, S, S_z, R | \xi_N^z f_{N,\uparrow}^\dagger \left| Q, S - \frac{1}{2}, S_z - \frac{1}{2}, R' \right\rangle_N + \\
&\quad \left(\frac{S - S_z}{2S} \right)_N^{\frac{1}{2}} \langle Q + 1, S, S_z, R | \xi_N^z f_{N,\downarrow}^\dagger \left| Q, S - \frac{1}{2}, S_z + \frac{1}{2}, R' \right\rangle_N
\end{aligned} \tag{3.36}$$

Os autoestados da iteração N são, naturalmente, combinações lineares dos vetores da base para aquela iteração:

$$|Q, S, S_z, R\rangle_N = \sum_{r,j} U_{Q,S}^{(R;r,j)} |Q, S, S_z, r; j\rangle_N. \tag{3.37}$$

Substituindo estas combinações lineares nos elementos de matriz acima, teremos, após algumas passagens:

$$\begin{aligned}
&{}_{N+1} \langle Q, S, S_z, R; 1 | \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \xi_N^z (f_{N,\sigma}^\dagger f_{N+1,\sigma} + h.c.) | Q, S, S_z, R'; 2 \rangle_{N+1} \\
&= \sum_r U_{Q+1,S}^{(R;r,2)} U_{Q,S-\frac{1}{2}}^{(R';r,1)} + \sqrt{\frac{2S}{2S+1}} U_{Q+1,S}^{(R;r,4)} U_{Q,S-\frac{1}{2}}^{(R';r,3)}
\end{aligned} \tag{3.38}$$

que, como esperado, não depende de S_z . Com esta equação e as outras correspondentes aos demais casos, podemos montar a matriz de H_{N+1} e, enfim, diagonalizá-la, para depois passarmos à iteração $N + 2$, desta à $N + 3$, e assim sucessivamente.

No início do processo iterativo, ou seja na iteração -1, onde o Hamiltoniano só contém operadores da impureza, a diagonalização é feita analiticamente com os resultados sendo inseridos no programa, que, então, procede com a seqüência de iterações.

III.4 A banda de condução livre da impureza e pontos fixos

Nesta seção vamos discutir as características do Hamiltoniano desacoplado ou da parte do Hamiltoniano acoplado correspondente à banda de condução, que nós chamaremos H_N^0 . Sem considerar spin,

$$H_N^0 = \Lambda^{\frac{N-1}{2}} \sum_{n=0}^{N-1} \Lambda^{\frac{-n}{2}} \xi_n^z (f_n^\dagger f_{n+1} + h.c.). \tag{3.39}$$

Seguindo [6], os níveis de energia deste Hamiltoniano serão denotados por η_j , $j = \pm 1, \pm 2, \dots, \pm \frac{N+1}{2}$, se $N + 1$ for par e $\hat{\eta}_j$, $j = 0, \pm 1, \dots, \pm \frac{N}{2}$, se $N + 1$ for ímpar. Há um total de $N + 1$

níveis de energia dispostos simetricamente em torno do valor zero. Assim para $N + 1$ ímpar há um nível com energia igual a zero e

$$\eta_{-j} = -\eta_j \quad (3.40a)$$

$$\hat{\eta}_{-j} = -\hat{\eta}_j, \quad (3.40b)$$

À medida que o valor de N aumenta, os níveis de energia deste Hamiltoniano aproximam-se dos valores $\pm \Lambda^{\frac{N-1}{2}} \frac{E_n}{1+\Lambda^{-1}}$, uma vez que o Hamiltoniano na forma tridiagonal vai convergindo para o Hamiltoniano diagonal (3.16). Esta aproximação é tanto melhor quanto maior for a energia, uma vez que as menores energias são mais significativamente afetadas pelo truncamento. Disto resulta que, para $j \gg 1$, temos

$$\eta_j^z \cong \Lambda^{j-1} \Lambda^{1-z} \quad (3.41a)$$

$$\hat{\eta}_j^z \cong \Lambda^{j-\frac{1}{2}} \Lambda^{1-z} \quad (3.41b)$$

Ao diagonalizarmos o Hamiltoniano (3.39) podemos reescrevê-lo na forma diagonal (a menos de uma constante)

$$H_N^0 = \sum_{j=1}^{\frac{N+1}{2}} \eta_j^z (g_j^\dagger g_j - h_j^\dagger h_j), \quad N + 1 \text{ par} \quad (3.42a)$$

$$H_N^0 = \hat{\eta}_0^z \hat{g}_0^\dagger \hat{g}_0 + \sum_{j=1}^{\frac{N}{2}} \hat{\eta}_j^z (\hat{g}_j^\dagger \hat{g}_j - \hat{h}_j^\dagger \hat{h}_j), \quad N + 1 \text{ ímpar}. \quad (3.42b)$$

Novamente se o valor de N for muito grande, estes operadores g_j ($\hat{g}_j$) e h_j ($\hat{h}_j$), tendem aos operadores a_n e b_n . Assim, sendo

$$f_0 = \sum_{j=1}^{\frac{N+1}{2}} \alpha_{0,j}^z (g_j + h_j), \quad N + 1 \text{ par}, \quad (3.43a)$$

$$f_0 = \hat{\alpha}_{0,0}^z \hat{g}_0 \sum_{j=1}^{\frac{N+1}{2}} \hat{\alpha}_{0,j}^z (\hat{g}_j + \hat{h}_j), \quad N + 1 \text{ ímpar}. \quad (3.43b)$$

com os coeficientes $\alpha_{0,j}^z$ ($\hat{\alpha}_{0,j}^z$) determinados pela diagonalização de (3.39), temos que, para

$j \gg 1$, valem as relações

$$\alpha_{0,j}^z \cong \Lambda^{-\frac{N-1}{4}} \Lambda^{\frac{1-z}{2}} \Lambda^{\frac{j-1}{2}} \sqrt{\frac{1-\Lambda^{-1}}{2}} \frac{1}{N_0} \langle f \rangle_j^z \quad (3.44a)$$

$$\hat{\alpha}_{0,j}^z \cong \Lambda^{-\frac{N}{4}} \Lambda^{\frac{1-z}{2}} \Lambda^{\frac{j}{2}} \sqrt{\frac{1-\Lambda^{-1}}{2}} \frac{1}{N_0} \langle f \rangle_j^z \quad (3.44b)$$

com

$$\langle f \rangle_j^z = \frac{1}{\Lambda^{-\frac{N-1}{2}-z+j}(1-\Lambda^{-1})} \int_{\Lambda^{-\frac{N-1}{2}-z+j-1}}^{\Lambda^{-\frac{N-1}{2}-z+j}} (1-\xi^2)^{\frac{1}{4}} d\xi \quad (3.45a)$$

$$\langle f \rangle_j^z = \frac{1}{\Lambda^{-\frac{N}{2}-z+j+1}(1-\Lambda^{-1})} \int_{\Lambda^{-\frac{N}{2}-z+j}}^{\Lambda^{-\frac{N}{2}-z+j+1}} (1-\xi^2)^{\frac{1}{4}} d\xi. \quad (3.45b)$$

À medida que N aumenta, os autovalores de H_N^0 tendem a valores fixos $\eta_j^*(\hat{\eta}_j^*)$ (o número de níveis aumenta quando N aumenta, mas os níveis comuns a dois valores de N têm as mesmas energias) e, então, dizemos que H_N^0 aproxima-se de um *ponto fixo*. Este ponto fixo será denotado por $H^*(N+1 \text{ par})$ ou $\hat{H}^*(N+1 \text{ ímpar})$.

Por exemplo, para $\Lambda = 10$ e $z = 1$, temos

$$\eta_j^* : 0.94820453, 9.9999949, (10)^2, (10)^3, (10)^4, \dots, (N+1) \text{ par};$$

$$\hat{\eta}_j^* : 3.16068016, 31.62277660, (10)^{5/2}, (10)^{7/2}, (10)^{9/2}, \dots, (N+1) \text{ ímpar}.$$

A relação de recorrência (3.27) determina uma sequência de Hamiltonianos, que pode ser dividida em duas, uma para valores de $N+1$ pares e outra para valores de $N+1$ ímpares. Se interpretamos cada conjunto de duas iterações como uma transformação nos levando do Hamiltoniano H_N para o H_{N+2} , então em um ponto fixo, a sequência de Hamiltonianos convergiu para um que é invariante sob esta transformação (salvo por alguns novos níveis de energia que aparecem, pois a dimensão do espaço vetorial onde nos encontramos a cada iteração aumenta com N).

Note que as equações (3.41) são a princípio válidas para $j \gg 1$, mas vemos que a partir de $j \geq 2$ os valores numéricos já concordam muito bem com essas expressões.

Quando acrescentamos ao Hamiltoniano (3.39) os termos correspondentes à energia do orbital da ilha, mais a repulsão coulombiana e mais o acoplamento da ilha à banda de condução, ficando com o Hamiltoniano acoplado (3.22), estamos introduzindo no problema três escalas

Figura III-3: Evolução dos 6 primeiros níveis de energia com o aumento das iterações. Só devem ser consideradas as iterações pares. Os patamares correspondem aos pontos fixos de elétrons livres, momento magnético localizado e impureza fortemente acoplada. Os valores no regime de impureza fortemente acoplada (N grande) são dados em termos de η_j ao invés de $\hat{\eta}_j$ devido à defasagem de $\frac{\pi}{2}$ nos níveis de energia decorrente do acoplamento com a impureza. O valor $2\eta_1 + \eta_2$ corresponde, por exemplo, à excitação de um par partícula-buraco mais uma partícula.

de energia características, ϵ_0^* , U^* e $\Gamma^*(0)$ respectivamente. Conseqüentemente, surgirão novos pontos fixos, dos quais nossa seqüência de Hamiltonianos, H_N , se aproximará e se afastará, até que, para N suficientemente grande, ela convergirá para um deles, permanecendo estável aí. Isto está ilustrado na Fig. 3, onde representamos a evolução de alguns níveis de energia em função de N .

Desconsiderando o fator $\Lambda^{-\frac{N-1}{2}}$, a cada iteração são introduzidas novas energias em escalas cada vez menores, assim, se no início das iterações os valores de ϵ_0^* , U^* e $\Gamma^*(0) \ll \Lambda^{-\frac{N-1}{2}}$, as energias dos estados excitados são dadas essencialmente pelos níveis $\eta_j^*(\hat{\eta}_j^*)$. À medida que N aumentará, $\Lambda^{-\frac{N-1}{2}}$ ficará compatível com o maior valor dentre ϵ_0^* , U^* e $\Gamma^*(0)$, e nossa seqüência de Hamiltonianos vai gradativamente se afastando do ponto fixo anterior e passa a se aproximar de um outro. Próximo a este novo ponto fixo, as excitações também são dadas aproximadamente por $\eta_j^*(\hat{\eta}_j^*)$, e por isto o Hamiltoniano da banda livre (3.39) é importante para nós. A situação acima descrita volta a se repetir à medida que prosseguimos com o aumento de N , uma nova escala de energia passa a ficar compatível com $\Lambda^{-\frac{N-1}{2}}$, e em relação a esta escala, o parâmetro

que causou o primeiro afastamento do ponto fixo, é muito grande, de modo que, no que diz respeito às excitações mais baixas no espectro, ele basicamente não influencia. Estas mudanças de ponto fixo vão ocorrendo até que não haja mais escalas de energia características a serem incorporadas ao problema, quando é atingido um ponto fixo estável.

III.4.1 Pontos fixos

Nesta subseção apresentaremos os vários pontos fixos que podem ser encontrados no modelo de Anderson e, em seguida, identificaremos aqueles presentes nos casos (conjunto de parâmetros: $\epsilon_d, U, \Gamma(0)$) discutidos nesta dissertação.

Os pontos fixos são identificados tomando-se valores limites para ϵ_d, U , e $\Gamma(0)$ em H_0 , que é, na sequência de Hamiltonianos H_N , o primeiro a apresentar estes três parâmetros, e, em seguida, incorporando os demais termos para gerar H_N . Assim temos:

a) Ponto fixo da ilha livre: obtido colocando-se ϵ_d, U e $\Gamma(0) \rightarrow 0$. Desta forma as energias do Hamiltoniano são dadas pelo espectro de H_N^0 ou $\widehat{H}_N^0$. Este é o ponto fixo das primeiras iterações, quando os valores dos parâmetros são pequenos em comparação com a menor escala de energia presente na parte $\Lambda^{\frac{N-1}{2}} \sum_{n=0}^{N-1} \Lambda^{\frac{-n}{2}} \xi_n^z (f_n^\dagger f_{n+1} + h.c.)$ do Hamiltoniano.

b) Ponto fixo de momento magnético localizado: obtido colocando-se $\Gamma(0) \rightarrow 0, \epsilon_d \rightarrow -\infty, U \rightarrow \infty$. Neste caso a ilha está desacoplada da banda e no estado fundamental ela está ocupada por 1 elétron, dando origem ao momento magnético localizado. Quando ϵ_d não é infinito mas o estado fundamental da ilha isolada também possui 1 elétron, este ponto fixo será atingido quando a menor energia (em módulo) de $\Lambda^{\frac{N-1}{2}} \sum_{n=0}^{N-1} \Lambda^{\frac{-n}{2}} \xi_n^z (f_n^\dagger f_{n+1} + h.c.)$ for da ordem de $|\epsilon_d|$.

c) Ponto fixo da ilha fortemente acoplada: obtido colocando-se $\Gamma(0) \rightarrow \infty, \epsilon_d$ e $U \rightarrow 0$. Neste caso o estado fundamental de H_0 é o singlete $(f_{0,\uparrow}^\dagger c_{0,\downarrow}^\dagger - f_{0,\downarrow}^\dagger c_{0,\uparrow}^\dagger) |\emptyset\rangle$, sendo que os demais estados estão separados deste por energias infinitas ($\Gamma(0) \rightarrow \infty$). Ao incorporarmos os demais termos, teremos que excluir aqueles contendo $f_0^\dagger$ ou f_0 pois eles permitem o acoplamento com os estados excitados de H_0 . Desta forma, neste ponto fixo, as energias são dadas pelo Hamiltoniano $\Lambda^{\frac{N-1}{2}} \sum_{n=1}^{N-1} \Lambda^{\frac{-n}{2}} \xi_n^z (f_n^\dagger f_{n+1} + h.c.)$. Se renomearmos f_1 por f_0, f_2 por f_1 e assim sucessivamente, este Hamiltoniano passa a ser $\Lambda^{\frac{N-1}{2}} \sum_{n=0}^{(N-1)-1} \Lambda^{\frac{-n}{2}} \xi_n^z (f_n^\dagger f_{n+1} + h.c.)$, de modo que se estávamos truncando em N par, teremos, agora, truncamento em N ímpar e vice-versa.

Este é o ponto fixo para onde o Hamiltoniano sempre se aproxima para N suficientemente

grande. A transição entre o ponto fixo anterior e este caracteriza o efeito Kondo.

d) Ponto fixo de valência flutuante: obtido colocando-se $\Gamma(0) \rightarrow 0$, $\Delta = \epsilon_d + U \rightarrow 0$, $\epsilon_d \rightarrow -\infty$. Neste caso a ilha isolada pode ter como estado fundamental a ilha com 1 elétron ou com 2 elétrons.

e) Ponto fixo de ilha duplamente ocupada: obtido colocando-se $\Gamma(0) \rightarrow 0$, $U \rightarrow 0$, $\epsilon_d \rightarrow -\infty$.

f) Ponto fixo de ilha vazia: obtido colocando-se $\Gamma(0) \rightarrow 0$, $U > 0$, $\epsilon_d \rightarrow +\infty$.

Nesta dissertação, calculamos a condutância em função da frequência para dois conjuntos de parâmetros. Um deles representando o caso simétrico do modelo de Anderson ($2\epsilon_d + U = 0$) e o outro representando um caso de valência flutuante mas com $\Gamma(0) > |\Delta|$. A sequência de pontos fixos atingidos em cada uma destas situações está esquematizada na Fig. 4.

III.5 O operador corrente e o procedimento de cálculo da condutância segundo o GRN

Conforme a equação (2.28) nos indica, deveremos calcular elementos de matriz do operador corrente e, portanto, devemos analisar como fica escrito este operador após fazermos sobre ele toda a sequência de transformações feitas no Hamiltoniano.

Temos que o operador corrente pode ser dado por uma das duas formas equivalentes abaixo:

$$I_0 = -i\frac{e}{\hbar}V \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} (c_{0,\sigma}^\dagger c_{1,\sigma} - c_{1,\sigma}^\dagger c_{0,\sigma}) \text{ ou} \quad (3.46a)$$

$$I_0 = -i\frac{e}{\hbar}V \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} (c_{N-1,\sigma}^\dagger c_{0,\sigma} - c_{0,\sigma}^\dagger c_{N-1,\sigma}). \quad (3.46b)$$

Se substituirmos $c_{1,\sigma}$ e $c_{N-1,\sigma}$ pelas respectivas combinações lineares que os fornecem em função dos operadores $c_{k_m,\sigma}$, teremos

$$I_0 = -i\frac{e}{\hbar}V \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \sqrt{\frac{2}{N}} \sum_{m=1}^{N-1} \text{sen}(k_m a) (c_{0,\sigma}^\dagger c_{k_m,\sigma} - c_{k_m,\sigma}^\dagger c_{0,\sigma}) \text{ ou} \quad (3.47a)$$

$$I_0 = i\frac{e}{\hbar}V \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \sqrt{\frac{2}{N}} \sum_{m=1}^{N-1} (-1)^m \text{sen}(k_m a) (c_{k_m,\sigma}^\dagger c_{0,\sigma} - c_{0,\sigma}^\dagger c_{k_m,\sigma}). \quad (3.47b)$$

Caso simétrico

Valência flutuante com $\Gamma(0) > \Delta$

Figura III-4: Para energias altas, ambos os casos encontram-se no ponto fixo de ilha livre. Diminuindo a energia há o *crossing over* para outro ponto fixo quando atingimos energias da ordem de ϵ_d . No caso simétrico vamos para o ponto fixo de momento localizado e no outro vamos para o ponto fixo de valência flutuante. Seguindo com a diminuição de energia, atingimos valores da ordem de $\Gamma(0)$ e, novamente, há uma passagem para outro ponto fixo. Agora ambos se dirigem para o ponto fixo de ilha fortemente acoplada. No caso assimétrico, se $\Delta > \Gamma(0)$, antes do ponto fixo de ilha fortemente acoplada, o sistema passaria pelo ponto fixo de momento localizado e haveria efeito Kondo.

Se somarmos estas duas possibilidades e dividir o resultado por 2, encontraremos

$$I_0 = -i \frac{e}{\hbar} V \sqrt{\frac{2}{N}} \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \sum_{m \text{ par}} \text{sen}(k_m a) (c_{0,\sigma}^\dagger c_{k_m,\sigma} - c_{k_m,\sigma}^\dagger c_{0,\sigma}), \quad (3.48)$$

onde os operadores $c_{k_m,\sigma}$ e $c_{k_m,\sigma}^\dagger$ com m ímpar foram eliminados da expressão, e nós temos, agora, que o operador corrente contém processos onde é destruído um elétron na ilha e é criado um elétron na banda de condução *desacoplada* ou é destruído um elétron nesta banda e é criado um elétron na ilha.

Ao fazermos $L \rightarrow \infty$, e procedermos com transformações similares àquelas realizadas sobre o Hamiltoniano, teremos finalmente

$$\frac{I_0}{\frac{e}{\hbar} D} = I^* \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} f_{0,\sigma,d}^\dagger c_{0,\sigma} - c_{0,\sigma}^\dagger f_{0,\sigma,d}, \quad (3.49)$$

onde

$$I^* = i \sqrt{\frac{\Gamma(0)}{4\pi t}} N_0. \quad (3.50)$$

Os estados do Hamiltoniano desacoplado são formados a partir dos níveis de partícula independente discutidos na seção anterior sendo fácil determinar a contribuição dos mesmos aos elementos de matriz $\langle 0 | I_0 | m \rangle$.

Considerando a seguinte notação:

estado fundamental da banda desacoplada = $|\phi_d^0\rangle$;

k -ésimo estado excitado da banda desacoplada = $|\phi_d^k\rangle$;

estado fundamental da banda acoplada à ilha = $|\phi_a^0\rangle$;

k -ésimo estado excitado da banda acoplada à ilha = $|\phi_a^k\rangle$, um estado excitado genérico $|m\rangle$ é da forma $|\phi_d^k\rangle \otimes |\phi_a^{k'}\rangle$, onde k e k' não são simultaneamente iguais a zero.

Então o elemento de matriz do operador corrente também se separa:

$$\begin{aligned} \langle 0 | I_0 | m \rangle = & \frac{eD}{\hbar} I^* \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} [\langle \phi_d^0 | f_{0,\sigma,d}^\dagger | \phi_d^k \rangle \times \langle \phi_a^0 | c_{0,\sigma} | \phi_a^{k'} \rangle - \\ & \langle \phi_d^0 | f_{0,\sigma,d} | \phi_d^k \rangle \times \langle \phi_a^0 | c_{0,\sigma}^\dagger | \phi_a^{k'} \rangle] \end{aligned} \quad (3.51)$$

Vemos da equação acima que apenas os estados excitados do Hamiltoniano desacoplado formados pela excitação de uma partícula ou de um buraco contribuem para os elementos de matriz e, após simples manipulações, encontramos para a parte real da condutância a seguinte expressão:

$$\begin{aligned}
& \pi \hbar \sum_{m \neq 0} 2 |\langle 0 | I_0 | m \rangle|^2 \delta(E_{m0}^2 - (\hbar\omega)^2) = \\
& \frac{2\pi}{\hbar} (eDI^*)^2 \left\{ \sum_{\substack{part \uparrow d, \\ k'}} \left| \langle \phi_d^0 | f_{0,\uparrow,d} | part. \uparrow \rangle \langle \phi_a^0 | c_{0,\uparrow}^\dagger | \phi_a^{k'} \rangle \right|^2 \frac{\delta(E_d + E_a - \hbar\omega)}{2(E_d + E_a)} \right. \\
& + \sum_{\substack{part \downarrow d, \\ k'}} \left| \langle \phi_d^0 | f_{0,\downarrow,d} | part. \downarrow \rangle \langle \phi_a^0 | c_{0,\downarrow}^\dagger | \phi_a^{k'} \rangle \right|^2 \frac{\delta(E_d + E_a - \hbar\omega)}{2(E_d + E_a)} \\
& + \sum_{\substack{bur \uparrow d, \\ k'}} \left| \langle \phi_d^0 | f_{0,\uparrow,d}^\dagger | bur. \uparrow \rangle \langle \phi_a^0 | c_{0,\uparrow} | \phi_a^{k'} \rangle \right|^2 \frac{\delta(E_d + E_a - \hbar\omega)}{2(E_d + E_a)} \\
& \left. + \sum_{\substack{bur \downarrow d, \\ k'}} \left| \langle \phi_d^0 | f_{0,\downarrow,d}^\dagger | bur. \downarrow \rangle \langle \phi_a^0 | c_{0,\downarrow} | \phi_a^{k'} \rangle \right|^2 \frac{\delta(E_d + E_a - \hbar\omega)}{2(E_d + E_a)} \right\} \quad (3.52)
\end{aligned}$$

Da seção anterior podemos reescrever:

$$\begin{aligned}
& \pi \hbar \sum_{m \neq 0} 2 |\langle 0 | I_0 | m \rangle|^2 \delta(E_{m0}^2 - (\hbar\omega)^2) \\
& = \frac{2\pi}{\hbar} (eDI^*)^2 \left\{ \sum_{j,k'} \left| \alpha_{0,j}^{z_d} \langle \phi_a^0 | c_{0,\uparrow}^\dagger | \phi_a^{k'} \rangle \right|^2 \frac{\delta(\varepsilon_j^{z_d} + E_a - \hbar\omega)}{2(\varepsilon_j^{z_d} + E_a)} \right. \\
& \quad + \sum_{j,k'} \left| \alpha_{0,j}^{z_d} \langle \phi_a^0 | c_{0,\downarrow}^\dagger | \phi_a^{k'} \rangle \right|^2 \frac{\delta(\varepsilon_j^{z_d} + E_a - \hbar\omega)}{2(\varepsilon_j^{z_d} + E_a)} \\
& \quad + \sum_{j,k'} \left| \alpha_{0,j}^{z_d} \langle \phi_a^0 | c_{0,\uparrow} | \phi_a^{k'} \rangle \right|^2 \frac{\delta(\varepsilon_j^{z_d} + E_a - \hbar\omega)}{2(\varepsilon_j^{z_d} + E_a)} \\
& \quad \left. + \sum_{j,k'} \left| \alpha_{0,j}^{z_d} \langle \phi_a^0 | c_{0,\downarrow} | \phi_a^{k'} \rangle \right|^2 \frac{\delta(\varepsilon_j^{z_d} + E_a - \hbar\omega)}{2(\varepsilon_j^{z_d} + E_a)} \right\} \quad (3.53)
\end{aligned}$$

onde os coeficientes $\alpha_{0,j}^{z_d}$ e as energias $\varepsilon_j^{z_d}$ podem ser calculados com um truncamento bem alto, ou seja, no limite $N \rightarrow \infty$, já que eles dizem respeito à banda desacoplada e não é necessário recorrermos a procedimentos numéricos para diagonalizá-la. Nesta condição as relações 3.41 e 3.44 valem exatamente e temos

$$\varepsilon_j = \frac{1 + \Lambda^{-1}}{2} \Lambda^{-\frac{N-1}{2}} \times \eta_j(\hat{\eta}_j) \quad (3.54)$$

A dificuldade concentra-se, portanto, no cálculo dos elementos de matriz envolvendo os estados excitados do Hamiltoniano acoplado, o qual será desenvolvido na subseção a seguir.

III.5.1 Elementos de matriz invariantes

Os operadores $c_{0,\uparrow}$, $c_{0,\downarrow}$ tomados em conjunto constituem um operador tensorial irredutível^[21], conforme pode ser verificado facilmente utilizando-se as relações do Apêndice C, e, portanto podemos aplicar o Teorema de Wigner-Eckart ao cálculo de elementos de matriz da forma:

$$\begin{aligned} {}_N \langle Q, S, S_z, R | c_{0,\uparrow} | Q + 1, S', S_z + 1/2, R' \rangle \\ {}_N \langle Q, S, S_z, R | c_{0,\downarrow} | Q + 1, S', S_z - 1/2, R' \rangle_N \end{aligned}$$

Segundo esse Teorema os elementos de matriz acima são proporcionais a coeficientes de Clebsch-Gordan (C-G), que, no nosso caso, são as projeções dos autovetores de J^2 e J_z , com autovalores $S(S+1)\hbar^2$ e $\hbar S_z$, obtidos pela soma dos momenta angulares S' e $\frac{1}{2}$, sobre vetores da forma $|S', S_z \pm \frac{1}{2}\rangle \otimes |\frac{1}{2}, \mp \frac{1}{2}\rangle$. O coeficiente de proporcionalidade, e este é o conteúdo do Teorema, não depende de S_z e nem se é $c_{0,\uparrow}$ ou $c_{0,\downarrow}$, sendo chamado de elemento de matriz invariante. Portanto, temos

$$\begin{aligned} {}_N \langle Q, S, S_z, R | c_{0,\uparrow} | Q + 1, S', S_z + 1/2, R' \rangle_N = \\ {}_N \langle Q, S, R | c_0 | Q + 1, S', R' \rangle_N {}_N \langle S', S_z + 1/2; 1/2, -1/2 | S, S_z \rangle_N \end{aligned} \quad (3.55)$$

e

$$\begin{aligned} {}_N \langle Q, S, S_z, R | c_{0,\downarrow} | Q + 1, S', S_z - 1/2, R' \rangle_N = \\ {}_N \langle Q, S, R | c_0 | Q + 1, S', R' \rangle_N {}_N \langle S', S_z - 1/2; 1/2, +1/2 | S, S_z \rangle_N. \end{aligned} \quad (3.56)$$

Das equações acima vemos que, para os elementos de matriz serem não nulos, S' deve ser igual a $S \pm \frac{1}{2}$.

Muito bem, nosso objetivo principal nesta seção é calcular os elementos de matriz do tipo $\langle \phi_a^0 | c_{0,\uparrow} | \phi_a^k \rangle$ na etapa $N + 1$, supondo conhecidos os da etapa N . Como vimos acima, $\langle \phi_a^0 | c_{0,\uparrow} | \phi_a^k \rangle = \langle \phi_a^0 | c_0 | \phi_a^k \rangle \times (C - G)$, de modo que, ao invés de calcular os elementos de matriz, podemos calcular os elementos de matriz invariantes, que, assim como os elementos de matriz do Hamiltoniano, independem de S_z . Os cálculos estão desenvolvidos no Apêndice D e

os resultados são os seguintes:

$$\begin{aligned}
& {}_{N+1} \langle Q, S, R | c_0 | Q+1, S-1/2, R' \rangle_{N+1} = \\
& \sum_{r,r'} [U_{Q,S}^{(R;r,1)} U_{Q+1,S-\frac{1}{2}}^{(R';r',1)} {}_N \langle Q+1, S, r | c_0 | Q+2, S-1/2, r' \rangle_N + \\
& U_{Q,S}^{(R;r,4)} U_{Q+1,S-\frac{1}{2}}^{(R';r',4)} {}_N \langle Q-1, S, r | c_0 | Q, S-1/2, r' \rangle_N + \\
& (-1) U_{Q,S}^{(R;r,2)} U_{Q+1,S-\frac{1}{2}}^{(R';r',2)} {}_N \langle Q, S-1/2, r | c_0 | Q+1, S-1, r' \rangle_N + \\
& (-1) \frac{\sqrt{2S(2S+2)}}{2S+1} U_{Q,S}^{(R;r,2)} U_{Q+1,S+\frac{1}{2}}^{(R';r',2)} {}_N \langle Q, S-1/2, r | c_0 | Q+1, S, r' \rangle_N + \\
& \frac{1}{2S+1} U_{Q,S}^{(R;r,3)} U_{Q+1,S+\frac{1}{2}}^{(R';r',2)} {}_N \langle Q, S+1/2, r | c_0 | Q+1, S, r' \rangle_N] \quad (3.57)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& {}_{N+1} \langle Q, S, R | c_0 | Q+1, S+1/2, R' \rangle_{N+1} = \\
& \sum_{r,r'} [U_{Q,S}^{(R;r,1)} U_{Q+1,S+\frac{1}{2}}^{(R';r',1)} {}_N \langle Q+1, S, r | c_0 | Q+2, S+1/2, r' \rangle_N + \\
& U_{Q,S}^{(R;r,4)} U_{Q+1,S+\frac{1}{2}}^{(R';r',4)} {}_N \langle Q-1, S, r | c_0 | Q, S+1/2, r' \rangle_N + \\
& (-1) U_{Q,S}^{(R;r,3)} U_{Q+1,S+\frac{1}{2}}^{(R';r',3)} {}_N \langle Q, S+1/2, r | c_0 | Q+1, S+1, r' \rangle_N + \\
& (-1) \frac{\sqrt{2S(2S+2)}}{2S+1} U_{Q,S}^{(R;r,2)} U_{Q+1,S+\frac{1}{2}}^{(R';r',2)} {}_N \langle Q, S-1/2, r | c_0 | Q+1, S, r' \rangle_N + \\
& \frac{1}{2S+1} U_{Q,S}^{(R;r,3)} U_{Q+1,S+\frac{1}{2}}^{(R';r',2)} {}_N \langle Q, S+1/2, r | c_0 | Q+1, S, r' \rangle_N] \quad (3.58)
\end{aligned}$$

Os elementos de matriz invariantes do operador $c_0^\dagger$ podem ser obtidos a partir daqueles do operador c_0 :

$$\begin{aligned}
& {}_{N+1} \langle Q, S, R | c_0^\dagger | Q-1, S-1/2, R' \rangle_{N+1} \\
& = \sqrt{\frac{2S}{2S+1}} {}_{N+1} \langle Q-1, S-1/2, R' | c_0 | Q, S, R \rangle_{N+1} \quad (3.59)
\end{aligned}$$

E, analogamente:

$$\begin{aligned}
& {}_{N+1} \langle Q, S, R | c_0^\dagger | Q-1, S+1/2, R' \rangle_{N+1} \\
& = -\sqrt{\frac{2S+2}{2S+1}} {}_{N+1} \langle Q-1, S+1/2, R' | c_0 | Q, S, R \rangle_{N+1}. \quad (3.60)
\end{aligned}$$

Figura III-5: A partir do cálculo com diferentes valores de z , somos capazes de suavizar o espectro, obtendo uma curva contínua para a condutância em função da frequência.

III.5.2 Procedimento de cálculo para determinação da condutância em função da frequência

Feitas todas as considerações acima estamos prontos para estabelecer um procedimento de cálculo para a determinação da condutância. A expressão a ser avaliada está bem estabelecida, trata-se do lado direito da equação 3.53. A questão é saber como suavizarmos esta soma de funções delta de Dirac, as quais, de um ponto de vista matematicamente mais rigoroso, só têm sentido dentro de uma integral, de modo que temos de passar a somar em um contínuo.

No cálculo da densidade espectral da impureza^[20] no mesmo Modelo de Anderson com o qual estamos trabalhando, surge uma situação análoga e lá este problema é contornado muito satisfatoriamente considerando o parâmetro z como uma variável contínua e tomando-se a integral nesta variável. Para nós há duas bandas de condução e, portanto, utilizamos z_a, z_d :

$$\begin{aligned} \text{Re}\{G_\infty(\omega)\} = & \int_{z_a=0.5}^{1.5} \int_{z_d=0.5}^{1.5} \left\{ \frac{2\pi}{\hbar} (eDI^*)^2 \times \right. \\ & \left\{ \sum_{j,k} \left| \alpha_{0,j}^{z_d} \left\langle \phi_a^0 \left| c_{0,\uparrow}^\dagger \right| \phi_a^k(z_a) \right\rangle \right|^2 \frac{\delta(\varepsilon_j^{z_d} + E_a(z_a) - \hbar\omega)}{2(\varepsilon_j^{z_d} + E_a(z_a))} \right. \\ & + \sum_{j,k} \left| \alpha_{0,j}^{z_d} \left\langle \phi_a^0 \left| c_{0,\downarrow}^\dagger \right| \phi_a^k(z_a) \right\rangle \right|^2 \frac{\delta(\varepsilon_j^{z_d} + E_a(z_a) - \hbar\omega)}{2(\varepsilon_j^{z_d} + E_a(z_a))} \\ & \left. + \sum_{j,k} \left| \alpha_{0,j}^{z_d} \left\langle \phi_a^0 \left| c_{0,\uparrow} \right| \phi_a^k(z_a) \right\rangle \right|^2 \frac{\delta(\varepsilon_j^{z_d} + E_a(z_a) - \hbar\omega)}{2(\varepsilon_j^{z_d} + E_a(z_a))} \right\} \end{aligned}$$

$$+ \sum_{j,k} \left| \alpha_{0,j}^{z_d} \left\langle \phi_a^0 | c_{0,\downarrow} | \phi_a^k(z_a) \right\rangle \right|^2 \frac{\delta(\varepsilon_j^{z_d} + E_a(z_a) - \hbar\omega)}{2(\varepsilon_j^{z_d} + E_a(z_a))} \Bigg\} dz_d dz_a. \quad (3.61)$$

Vamos analisar detalhadamente um dos quatro termos acima, uma vez que os demais são análogos. Fazendo a integração em z_d primeiro, teremos

$$\frac{2\pi}{\hbar} \sum_k \int_{0.5}^{1.5} (eDI^*)^2 \frac{\left| \left\langle \phi_a^0 | c_{0,\uparrow}^\dagger | \phi_a^k(z_a) \right\rangle \right|^2}{2\hbar\omega} \frac{\left| \alpha_{0,j_0}^{z_0} \right|^2}{\left| \frac{d\varepsilon_j^{z_d}}{dz_d} \right|_{z_d=z_0}} dz_a \quad (3.62)$$

onde z_0 e j_0 são tais que $\varepsilon_{j_0}^{z_0} + E_a(z_a) = \hbar\omega$. A soma sobre os estados excitados estende-se somente sobre aqueles com energia menor que $\hbar\omega$ e tais que $\left\langle \phi_a^0 | c_{0,\uparrow}^\dagger | \phi_a^k(z_a) \right\rangle \neq 0$. Conforme podemos verificar pelas equações 3.44, 3.41 e 3.54, a razão $\frac{\left| \alpha_{0,j_0}^{z_0} \right|^2}{\left| \frac{d\varepsilon_j^{z_d}}{dz_d} \right|_{z_d=z_0}}$ é igual a

$$\frac{1}{2A_\Lambda} \frac{1}{N_0^2} (\langle f \rangle_{j_0})^2$$

onde

$$A_\Lambda = \frac{\Lambda + 1}{\Lambda - 1} \frac{\ln \Lambda}{2}. \quad (3.63)$$

O fator $(\langle f \rangle_{j_0})^2$ pode ser substituído por 1 (Eq. 3.45), uma vez que ele vem da banda desacoplada onde o truncamento pode ser feito em um valor $N_{desac.}$ arbitrariamente alto, onde podemos ter

$$N_{desac.} \gg j_0 \gg 1.$$

A constante de normalização ao quadrado, N_0^2 , será cancelada pela constante de normalização contida no fator I^* (Eq. 3.50).

Janelas de cálculo

Estas janelas são os intervalos em energia onde tomaremos pontos $\hbar\omega$ nos quais calcularemos a condutância. Em cada iteração N (par), a cada valor de z corresponde uma janela limitada inferiormente pela menor energia encontrada nos subespaços $(Q = 1, S = 1/2)$ e $(Q = -1, S = 1/2)$ e superiormente pela energia de corte utilizada para este valor de z .

Figura III-6: Ilustração da energia de corte em função de z . Considerando que ela fosse proporcional a Λ^{1-z} teríamos a exponencial. Mas estas energias de corte nos forçam a considerar uma janela de corte muito estreita (faixa cinza). Para alargá-la passamos a tomar a energia de corte seguindo a exponencial até $z = 1$, e daí para frente a mantemos constante.

Tipicamente adotaríamos para a energia de corte a seguinte dependência em z :

$$E_{corte} = E_0 \Lambda^{1-z},$$

baseados na dependência de η_j com z . Desta forma as janelas em z ficariam como desenhadas na Fig. 6, e a janela de cálculo para a iteração N seria dada pelo intervalo

$$[E_{\min}(z = 0.5), E_{corte}(z = 1.5)].$$

Porém, para um valor típico de 40 para E_0 , esta janela ficaria muito estreita, então adotamos

$$E_{corte}(z) = \begin{cases} E_0, & z \geq 1 \\ E_0 \Lambda^{1-z}, & z < 1. \end{cases} \quad (3.64)$$

Escolhemos alguns pontos na janela, $E_1, E_2, \dots, E_i, \dots, E_n$, aos quais correspondem as energias

$$\hbar\omega_i = D \frac{1 + \Lambda^{-1}}{2} \Lambda^{-\frac{N-1}{2}} E_i, \quad (3.65)$$

e a condutância em cada uma destas frequências é calculada como descrito na seção anterior,

considerando-se todos os níveis com energia menor que $\hbar\omega_i$.

O limite inferior da janela, em uma dada iteração N , é dado pela menor energia encontrada para diagonalização com $z = 0.5$, que não é arbitrariamente próxima de zero devido justamente ao truncamento em N , sendo portanto nosso corte infra-vermelho.

Os valores para E_i não devem ser escolhidos próximos ao limite inferior da janela, pois neste caso haveria poucos estados abaixo dos mesmos o que tornaria os resultados para a condutância nestas frequências pouco precisos. Mas devido à necessidade de estabelecermos a energia de corte em valores computacionalmente viáveis, o que caracteriza o nosso corte ultra-violeta, não podemos trabalhar com valores de E_i arbitrariamente altos e assim, temos de buscar um meio-termo capaz de conciliar a precisão dos resultados com o custo computacional envolvido para obtê-los.

Nós trabalhamos com valores pares de N , e, se a cada valor destes nós estabelecermos como janela efetiva, isto é, um intervalo onde podemos escolher *qualquer* energia, o intervalo

$$[\alpha, \alpha\Lambda],$$

então temos que

$$\alpha \gg 1,$$

para nos afastarmos do corte infra-vermelho, e

$$\alpha\Lambda = \text{Lim. sup. da janela} = E_{\text{corte}}(z = 1.5)$$

para aproveitarmos todas as altas energias disponíveis. Disto segue que

$$E_{\text{corte}}(z = 1.5) \gg \Lambda, \tag{3.66}$$

o que estabelece um critério para garantirmos precisão.

Em nosso caso, $\Lambda = 10$ e $E_{\text{corte}}(z = 1.5) = 40$ mostrou ser um valor capaz de atender o critério acima com um custo computacional moderado.

Para valores de N onde já nos encontramos no ponto fixo estável da ilha fortemente acoplada, este procedimento guia a melhores resultados quando calculamos $\omega G(\omega)$. Essencialmente o

problema em se calcular diretamente $G(\omega)$ é que no espectro de energias há poucos níveis onde os valores para

$$|\langle 0 | c_0 | Q = 1, S = 1/2, r \rangle|^2 \text{ ou } |\langle 0 | c_0^\dagger | Q = -1, S = 1/2, r \rangle|^2$$

são significativos, ou seja, onde as linhas espectrais são intensas, de modo que há uma certa liberdade para escolhermos ω_i e ainda mantermos o resultado numérico para o numerador,

$$G(\omega_i) = \frac{[\omega G(\omega)]}{\omega_i},$$

inalterado.

Mas neste ponto fixo as linhas fortes têm intensidades proporcionais à energia, o que significa que $G(\omega)$ já atingiu seu valor DC. Nós podemos calcular este valor quase analiticamente, utilizando os resultados numéricos apenas para determinar o coeficiente de proporcionalidade entre as intensidades das linhas e as energias.

Outra maneira utilizada por nós para calcular o valor DC da condutância foi calcular a defasagem no nível de Fermi. Para isto, lembramos que para um Hamiltoniano quadrático da forma $H = H_0 + V$, as defasagens δ (phase-shifts do espalhamento) podem ser calculadas por^[19]

$$\lim_{\Delta E_n \rightarrow 0} -\pi \frac{\delta E_n}{\Delta E_n}, \quad (3.67)$$

onde δE_n representa a diferença entre a energia do nível com a perturbação e a energia sem a perturbação, e ΔE_n é a diferença em energia entre dois níveis consecutivos de H_0 .

Nosso Hamiltoniano não é quadrático, mas, no ponto fixo, ele efetivamente comporta-se como se fosse para o espectro de energias próximas ao nível de Fermi. As linhas intensas possuem energias $E_{l.f.}$ que podemos escrever de forma genérica por

$$\Lambda^{-\gamma} \times \varepsilon_j, \quad (3.68)$$

enquanto os níveis não perturbados têm energias ε_j . Assim,

$$\delta E_n = (\Lambda^{-\gamma} - 1) \times \varepsilon_j,$$

$$\Delta E_n = (\Lambda - 1) \times \varepsilon_j,$$

portanto no limite do contínuo,

$$\delta(0) = \lim_{\Lambda \rightarrow 1} \frac{-\pi(\Lambda^{-\gamma} - 1)}{\Lambda - 1} = \pi\gamma, \quad (3.69)$$

ou seja,

$$\delta(0) = -\pi \ln\left(\frac{E_{\text{l.f.}}}{\varepsilon_j}\right) / \ln \Lambda, \quad (3.70)$$

onde $E_{\text{l.f.}}$ é a energia da linha forte em uma iteração com N grande o suficiente para já estarmos no ponto fixo da impureza fortemente acoplada e estarmos com energias próximas ao nível de Fermi, naturalmente.

Capítulo IV

Resultados e Discussão

Neste capítulo apresentaremos alguns resultados encontrados por nós. A densidade espectral do nível da ilha tem um papel fundamental para o entendimento dos resultados, pois como foi estabelecido no Capítulo II, a condutância em função da frequência pode ser escrita em termos dela:

$$\text{Re}\{G(\omega)\} = \frac{e^2}{h} \frac{2V^2}{D\hbar\omega} \times \int_0^{\hbar\omega} \sqrt{1 - \left(\frac{E}{2t}\right)^2} [\rho_{0,\uparrow}(-\hbar\omega + E) + \rho_{0,\uparrow}(\hbar\omega - E)] dE. \quad (4.1)$$

Preliminarmente é interessante compreendermos esta expressão com base nas possíveis transições que promovem a condução eletrônica através da ilha. Estas transições são de dois tipos (conforme podemos verificar a partir do operador corrente elétrica, Eq. (3. 49)): ou retiramos um elétron da ilha e o colocamos na banda desacoplada em um nível acima do nível de Fermi, pois os demais estão preenchidos a $T = 0$; ou retiramos um elétron da banda desacoplada, deixando um buraco na mesma, e colocando-o na ilha. Assim a condutância está relacionada com a taxa em que estas transições acontecem. Se pensarmos na regra de ouro de Fermi, podemos escrever a taxa de transição como sendo proporcional a

$$\sum_{\text{Est. finais}} |\langle \text{final} | \text{Perturbação} | \text{inicial} \rangle|^2 \delta(E_{\text{final}} - E_{\text{inicial}}), \quad (4.2)$$

onde a nossa perturbação é caracterizada pelo campo eletromagnético e deve ser proporcional ao operador corrente elétrica. Pensando no campo eletromagnético em termos de fótons, o

estado inicial é formado por um fóton com energia $\hbar\omega$ mais nosso anel no estado fundamental e, por fim, o estado final é formado por um estado excitado contendo ou uma partícula na banda desacoplada e um elétron a menos na ilha, ou um buraco na banda desacoplada e um elétron a mais na ilha. Vamos dividir a soma sobre estados finais, considerando

a) buraco na banda desacoplada e um elétron a mais na ilha:

neste caso, o buraco na banda desacoplada pode ter qualquer energia ϵ entre 0 e a meia largura D e o elétron pode entrar na ilha consumindo energia ϵ' para isto. Se trocarmos a soma por integrais teremos para a taxa de transição correspondente a esse processo algo proporcional a

$$\int_0^D d\epsilon \int_0^\infty d\epsilon' g(\epsilon) \rho_d(\epsilon') V^2 \delta(\epsilon + \epsilon' - \hbar\omega) = \int_0^{\hbar\omega} V^2 g(\epsilon) \rho_d(\hbar\omega - \epsilon) V^2 d\epsilon,$$

onde substituímos o elemento de matriz por V , $g(\epsilon)$ é a densidade de estados na banda desacoplada e interpretamos a densidade espectral do nível eletrônico da ilha para $\epsilon' > 0$ de forma que $\rho_d(\epsilon')d\epsilon'$ seja proporcional à probabilidade do elétron entrar na ilha com energia entre ϵ' e $\epsilon' + d\epsilon'$. O limite superior da integral foi alterado porque se $\hbar\omega < D$, então o argumento da função δ -Dirac é positivo para $\epsilon > \hbar\omega$ e estes pontos não contribuem para a integral e, se $\hbar\omega > D$, a densidade de estados $g(\epsilon)$ é nula para $\epsilon > D$ e não há problema em estender a integração até $\hbar\omega$.

b) elétron na banda desacoplada e um elétron a menos na ilha:

neste caso, o elétron na banda desacoplada pode ocupar qualquer estado com energia maior que o nível de Fermi e o resultado de trocar a soma por integral nos dá para a taxa de transição para esse processo algo proporcional a

$$\int_0^D d\epsilon \int_0^\infty d\epsilon' g(\epsilon) \rho_d(-\epsilon') V^2 \delta(\epsilon + \epsilon' - \hbar\omega) = \int_0^{\hbar\omega} V^2 g(\epsilon) \rho_d(-\hbar\omega + \epsilon) V^2 d\epsilon,$$

onde agora temos interpretado $\rho_d(-\epsilon')d\epsilon'$ como proporcional à probabilidade do elétron abandonar a ilha consumindo energia entre $\epsilon'(> 0)$ e $\epsilon' + d\epsilon'$ para isto.

Somando esses dois resultados teremos a taxa de transição total. A condutância deve ser proporcional a essa taxa de transição multiplicada pelo tempo de excitação. Este tempo é aproximadamente ω^{-1} , de modo que entendemos a Eq.4.1.

Outro ponto que devemos discutir é a relação entre a densidade espectral do estado da ilha em $\epsilon = 0$ e a defasagem no nível de Fermi na banda acoplada a ela. Temos a regra de soma de Friedel^{[22],[23]}, relacionando a defasagem no nível de Fermi com o número médio de ocupação da ilha,

$$\delta(0) = \frac{\pi}{2} \langle n_d \rangle. \quad (4.3)$$

E temos a relação entre a densidade espectral e a defasagem^[22]:

$$\rho(0) = \frac{1}{\pi\Gamma(0)} \sin^2(\delta(0)), \quad (4.4)$$

onde lembramos que

$$\Gamma(0) = 4 \frac{V^2}{D}.$$

A partir dessas relações podemos escrever o $\lim_{\omega \rightarrow 0} \text{Re}\{G(\omega)\}$ em termos da defasagem

$$G_{DC} \equiv \lim_{\omega \rightarrow 0} \text{Re}\{G(\omega)\} = \frac{e^2}{\pi\hbar} \sin^2(\delta(0)). \quad (4.5)$$

Calculando-se a defasagem para diferentes valores de ϵ_d , desde $\frac{-3U}{2}$ a $\frac{U}{2}$, (pois é neste intervalo que podemos fazer a correspondência entre nosso modelo para a ilha e o modelo de Anderson, conforme discutido previamente na Introdução) obtemos o resultado da Fig. 1 (já apresentado na Introdução). Enquanto o número de ocupação da ilha é muito diferente de 1, seja próximo de 2 ou próximo de 0, a condutância DC permanece baixa ($\ll \frac{e^2}{\pi\hbar}$). Para n_d próximo de 2, a energia da ilha isolada da banda e ocupada por 2 elétrons é menor que a energia da mesma quando ocupada por 1 elétron. À medida que o valor de ϵ_d é aumentado, atingimos a situação onde as energias da ilha isolada com 2 elétrons e com 1 elétron são iguais. É em torno deste ponto que ocorre a subida na condutância. Do lado direito do gráfico temos situação idêntica, só que envolvendo a ilha ocupada com 1 elétron ou vazia. Enquanto a energia da ilha vazia é menor que a da ilha com 1 elétron, ou seja, enquanto $\epsilon_d > 0$, a condutância é baixa. E no ponto em que estas energias se igualam, há a subida no gráfico.

Figura IV-1: Esta é a mesma figura apresentada na Introdução. Como nosso cálculo é feito a temperatura $T = 0$, o vale entre os picos característicos do bloqueio Coulombiano desaparece e ficamos com um patamar de alta condutância em correspondência à faixa de valores de ϵ_d onde o número de ocupação da ilha é essencialmente 1.

Na região entre as duas subidas ($-U < \epsilon_d < 0$), também não há degenerescência entre estados da ilha com diferentes números de ocupação e deveríamos esperar que a condutância voltasse a ser baixa nesta região, apresentando, portanto, dois picos com largura da ordem de $\Gamma(0)$, em $\epsilon_d = -U$ e $\epsilon_d = 0$. Isto, de fato, é encontrado experimentalmente quando a temperatura ambiente é muito maior que a temperatura Kondo, como já vimos na Fig. 3c da Introdução. Porém, para temperaturas menores que T_K , a condutância não diminui sensivelmente nessa região intermediária, onde o número de ocupação da ilha mantém-se próximo de 1. Em nosso cálculo a temperatura é 0 K, e temos praticamente um patamar onde a condutância é essencialmente igual a $\frac{e^2}{\pi h}$. Este é o efeito Kondo presente em nosso sistema. As Eq. 4.3 e 4.5 permitem-nos entender matematicamente este resultado. Do ponto de vista físico o que ocorre é que, havendo o *acoplamento* entre a banda e a ilha, e esta estando na condição favorável à ocupação por um único elétron, forma-se, no estado fundamental, um singleto composto pelo elétron da ilha e por um elétron da banda de condução. Mas, neste estado, o elétron da ilha pode ser encontrado tanto com spin $\uparrow$, como com spin $\downarrow$, e o elétron da banda de condução acompanha estas inversões de forma a manter o spin total nulo. Há também o estado tripleto,

distante em energia do singleto por um valor da ordem de $k_B T_K$, de forma que as inversões de spin acontecem durante intervalos de tempo da ordem de $\frac{\hbar}{k_B T_K}$. Se o tempo de excitação, ω^{-1} , for maior que esse intervalo, então a resposta a esta excitação será afetada por estas inversões. Em nosso caso, onde nosso modelo foi mapeado no modelo de Anderson cujo Hamiltoniano não possui termos que possibilitem a inversão de spin de um elétron da ilha, estas inversões são feitas por transições virtuais em que os estados da ilha vazia e duplamente ocupada são acessados, o que dá margem à condutância, pois o número de elétrons na ilha varia.

Quando a temperatura aumenta, ficando maior que T_K , o processo de inversão de spin na ilha começa a acontecer em tempos muito curtos ($\sim \frac{\hbar}{k_B T}$) e dessincronizada da inversão do estado eletrônico da banda mais acoplado à ilha, de modo que mesmo excitando o sistema durante um intervalo de tempo longo, nós não identificaremos aquele movimento ressonante descrito acima; em média, não conseguimos ver nada organizado, devido às excitações térmicas. Assim, a condutância é baixa.

É importante também notarmos a simetria do gráfico da Fig. 1 em relação a $\epsilon_0 = -\frac{U}{2}$, ou seja, em relação ao caso simétrico. Este fato é geral para o nosso modelo, pois o Hamiltoniano correspondente a um ponto à esquerda do eixo de simetria pode ser mapeado no Hamiltoniano correspondente ao seu par do lado direito do eixo de simetria pela seguinte transformação partícula-buraco:

$$\begin{aligned} c_k^\dagger &\rightarrow c_{\pi-k}, \\ c_0^\dagger &\rightarrow -c_0. \end{aligned}$$

Que os resultados para estes casos simétricos tem de ser idênticos pode ser visto da seguinte forma: ao fazermos a transformação indicada acima, podemos parar antes de colocar os operadores na ordem normal ($c^\dagger$ na frente de c) e então substituímos c por $g^\dagger$, onde este último cria um buraco. Assim o Hamiltoniano em termos destes operadores g é rigorosamente igual ao Hamiltoniano antes da transformação, a diferença sendo que, agora, trabalhamos com buracos. Isso não afeta a condutância pois o estado da ilha com 2 elétrons passa a corresponder ao estado com nenhum buraco, o estado da ilha com 1 elétron $\uparrow$ corresponde ao estado com um buraco $\downarrow$ e vice-versa, e, por fim, o estado sem elétrons corresponde ao estado com dois buracos, de modo que a condutância depende, nesta situação, da variação do número de buracos na ilha.

Figura IV-2: Densidade espectral no nível de energia da ilha em função da energia (em unidades de D) no caso simétrico. A curva é simétrica em relação à origem. Os picos fora da origem correspondem às transições da ilha com 1 elétron para a ilha vazia (à esquerda) e da ilha com 1 elétron para a ilha com 2 elétrons (à direita). O pico na origem corresponde ao pico Kondo, que provém das transições virtuais entre o estado onde a ilha tem 1 elétron para os demais.

Vamos, agora, analisar a dependência da condutância em função da frequência. Em virtude da Eq. 4.1, é importante que nós, inicialmente, abordemos a densidade espectral. Consideremos o caso simétrico, onde $2\epsilon_d + U = 0$. Se $\Gamma(0) = 0$, a ilha está desacoplada, e a densidade espectral é igual a

$$\rho_d(\epsilon) = \frac{1}{2}(\delta(\epsilon + |\epsilon_d|) + \delta(\epsilon - |\epsilon_d|)). \quad (4.6)$$

Quando introduzimos o acoplamento, naturalmente esperamos que estes picos se alarguem e passem a ter alturas finitas. Mas novamente, não ocorre apenas isto: surge um pico muito estreito na origem, pois no caso simétrico, o número de ocupação da ilha é rigorosamente igual a 1 (Fig. 2), e portanto a defasagem na origem, dada pela Eq. 4.4, é $\frac{1}{\pi\Gamma(0)}$. Este pico é tão mais alto (e em compensação mais estreito) quanto menor for o acoplamento. O estreitamento é mais rápido que o aumento de altura, de modo que o peso espectral diminui, até que para $\Gamma = 0$, o pico desaparece. O ponto é que, na presença do acoplamento, ele sempre existirá, não importa quão pequeno seja Γ . Claro que se Γ for muito pequeno, a detecção experimental do efeito Kondo fica comprometida, em virtude da necessidade de se baixar demais a temperatura durante o experimento. A Fig. 2 ilustra a densidade espectral para o caso simétrico.

Figura IV-3: Esta figura também foi apresentada na Introdução. Trata-se do gráfico da condutância em função da frequência para o caso simétrico ainda. Há um pico em alta frequência, correspondente à energia de excitação para retirar (colocar) um elétron da ilha (na ilha). Em um caso assimétrico há dois picos, pois essas energias são diferentes. Para baixa frequência, o pico Kondo da densidade espectral dá origem ao significativo aumento da condutância. A curva vermelha, que se ajusta ao resultado numérico em alta frequência, é obtida do cálculo analítico para o caso $U = 0$. A curva azul, que se ajusta ao resultado numérico em baixa frequência é obtida a partir de uma proposta de curva universal para a densidade espectral da impureza no regime Kondo.

Quando passamos ao caso assimétrico mas com o estado contendo 1 elétron na ilha permanecendo com a menor energia e separado dos demais estados (ilha vazia e ilha com 2 elétrons) por valores bem maiores que Γ , a densidade espectral é basicamente a mesma como aquela da Fig. 2, apenas que o pico do lado direito passa a estar centrado em $\Delta = \epsilon_d + U$, e o pico da origem diminui um pouquinho de altura além de deixar de estar rigorosamente posicionado, pois o número de ocupação não é mais rigorosamente 1. Essa diminuição é pequena, como podemos ver pela largura do patamar na Fig. 1.

A Fig. 4 ilustra a condutância para o caso simétrico onde $\epsilon_0 = -0.025D$ e $\Gamma(0) = 0.0036D = 0.072U$.

A curva vermelha corresponde à condutância para o caso $U = 0$, e foi obtida analiticamente.

Ela está aí para indicar que o pico em alta frequência na condutância para o caso simétrico concorda com o pico que ela apresenta. Este pico tem uma subida bem rápida do lado esquerdo, indicando que fora da ressonância ($\hbar\omega = |\epsilon_d|$) a condutância cai rapidamente; e, do lado direito, a condutância vai, assintoticamente, com $\frac{1}{\omega}$.

À medida que diminui a frequência a condutância começa a subir rapidamente até atingir o valor DC. Nas curvas da densidade espectral, o pico na origem é pouca coisa mais alto que os picos em $\pm|\epsilon_0|$, mas na curva da condutância, em virtude do fator $\frac{1}{\omega}$, o pico na origem fica bem maior que o outro. A curva em azul foi obtida introduzindo-se na Eq. 4.1 a expressão universal para região Kondo da densidade espectral^[29]:

$$\rho_0(\epsilon) = \frac{1}{\pi\Gamma(0)} \operatorname{Re} \left\{ \left[\frac{i\Gamma_K}{\epsilon + i\Gamma_K} \right]^{1/2} \right\},$$

donde obtemos para a condutância

$$\frac{\operatorname{Re}\{G(\omega)\}}{e^2/\pi\hbar} = \frac{\Gamma_K}{\hbar\omega} \sqrt{2} \left(\sqrt{1 + \left(\frac{\hbar\omega}{\Gamma_K} \right)^2} - 1 \right)^{1/2},$$

onde

$$\Gamma_K = \frac{k_B T_K}{0.206\pi}.$$

Para fazermos este ajuste, o único parâmetro disponível é Γ_K , para o qual encontramos o valor $3 \times 10^{-5}D$, que nos dá para a temperatura Kondo

$$k_B T_K = 1.94 \times 10^{-5}D.$$

Tipicamente podemos colocar $D \approx 3$ eV, donde T_K seria algo em torno de 0.67 K.

A seguir apresentamos resultados obtidos para um outro conjunto de parâmetros, representando um caso assimétrico correspondente a um ponto na subida à esquerda no gráfico da Fig.

1. O conjunto de parâmetros é o seguinte:

$$\begin{aligned} \epsilon_0/D &= -0.025, \\ U/D &= 0.02505, \end{aligned}$$

Figura IV-4: Novo gráfico da condutância em função da frequência para um caso assimétrico. Há dois picos mas o segundo pico, entre 10^{-2} e 10^{-1} não está visível neste gráfico. A sua existência é mais facilmente observada no gráfico da Fig. 5. Os parâmetros utilizados para obtenção desta curva foram tais que a ilha encontra-se com número de ocupação intermediário entre 2 e 1, por isto a condutância DC é menor que a do gráfico anterior.

$$\Gamma(0)/D = 0.0009 > (\epsilon_0 + U)/D.$$

Nesta situação a condutância apresenta um comportamento razoavelmente diferente daquele apresentado no caso simétrico. Primeiro, para altas frequências, há agora dois picos: um bem visível na Fig. 4, correspondente à ressonância $\hbar\omega = \epsilon_0 + U$, e, outro, pouco visível nesta figura, e correspondente à ressonância $\hbar\omega = |\epsilon_0|$. A presença deste segundo pico pode ser confirmada no gráfico da Fig. 5, onde ao invés da condutância está graficada $\frac{\hbar\omega}{D} \times$ condutância. A cada pico no primeiro gráfico, corresponde um subida abrupta no segundo. Segundo, para baixas energias, a condutância é bem menor que antes, pois a agora a banda está acoplada aos estados da ilha com 1 elétron e com 2 elétrons, de modo que a defasagem no nível de Fermi passa a ser maior que $\frac{\pi}{2}$, como ocorre no caso simétrico.

O gráfico da Fig. 6 foi construído somente para ilustrar uma maneira de determinar a condutância DC mais confiável que simplesmente olhar o resultado na Fig. 4. Isto porque o procedimento numérico é mais adaptado ao cálculo de $\frac{\hbar\omega}{D} \times$ condutância do que ao cálculo da

Figura IV-5: A ordenada neste gráfico é proporcional a $\omega G(\omega)$. É uma forma alternativa de se analisar a condutância, a qual é, inclusive, mais natural, tendo em vista nosso procedimento numérico. Aqui vemos duas subidas abruptas, que correspondem aos dois picos em alta frequência presentes no gráfico anterior. Em baixa frequência, uma vez que a condutância tende a um valor constante, $\omega G(\omega)$ vai a zero linearmente. Mas isto não está muito visível. No gráfico a seguir destacamos esta região.

Figura IV-6: Gráfico log x log de $\frac{\hbar\omega}{D}G(\omega)$ em função de $\frac{\hbar\omega}{D}$. A partir do coeficiente linear do mesmo podemos encontrar o valor da condutância DC.

condutância propriamente.

Capítulo V

Conclusão

Em retrospecto, na Introdução desta dissertação, caracterizamos nosso sistema físico sob estudo como composto de um sistema mesoscópico, a ilha, acoplado a dois gases eletrônicos. Em relação à condutância através da ilha, identificamos os dois efeitos que governam a resposta do nosso dispositivo a uma tensão aplicada, que são o bloqueio Coulombiano e o efeito Kondo. Ambos têm origem na repulsão eletrônica dentro da ilha, mas o primeiro atua no sentido de impedir o transporte de elétrons através da mesma, enquanto o segundo, que é um efeito essencialmente quântico, viabiliza este transporte. Discutimos os resultados experimentais que demonstraram pela primeira vez o efeito Kondo em nanoestruturas, onde vimos que o mapeamento no modelo de Anderson possibilita-nos entender suas características essenciais. Como observamos naquele momento, a previsão teórica do efeito Kondo nesse tipo de dispositivo, e mesmo o mapeamento no modelo de Anderson, foram feitos, já em 1988, por P. A. Lee e T. K. Ng^[2].

Após estabelecermos que calcularíamos a condutância em função da frequência para temperatura igual a 0 K e no regime de resposta linear, passamos ao segundo capítulo, onde estabelecemos de modo detalhado o modelo para o nosso sistema, ressaltando as aproximações envolvidas (gases unidimensionais, principalmente) e chegando à formulação do nosso sistema como composto pelo Modelo de Anderson mais uma banda desacoplada da ilha. A abordagem utilizada, formando o anel e excitando o sistema por um campo magnético variável no tempo, não é tão usual e é um aspecto importante desta dissertação. A partir daí, determinamos uma expressão para a condutância e a relacionamos com a densidade espectral do nível de energia da ilha. Essa é a principal relação desta dissertação, pois uma vez que a densidade espectral é

conhecida, o problema da condutância em função da frequência está resolvido. Cabe ressaltar que, em geral, calcula-se a densidade espectral do nível de energia da impureza no modelo de Anderson considerando-se o acoplamento da impureza com a banda independente da energia. Em nosso caso, em virtude da formulação a partir do modelo tight-binding, este acoplamento depende da energia. Como esta dependência é mais acentuada para altas energias, nesta região não podemos aproveitar precisamente a densidade espectral com acoplamento constante, porém, para baixas energias, o acoplamento torna-se essencialmente constante e podemos aproveitá-la sem problemas. Essa relação da condutância com a densidade espectral é particularmente útil para o cálculo a frequência igual a zero.

No capítulo 3, inicialmente discutimos as características essenciais do Grupo de Renormalização Numérico quando aplicado ao nosso problema, a saber, a discretização logarítmica da banda de condução, a sua tridiagonalização (procedimento de Lanczos) e o procedimento iterativo baseado na relação de recorrência

$$H_{N+1} = \Lambda^{\frac{1}{2}} H_N + \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \xi_N^z (f_{N,\sigma}^\dagger f_{N+1,\sigma} + h.c.),$$

que dá origem à transformação do GRN ($H_N \rightarrow H_{N+2}$). Esta transformação nos conduz aos pontos fixos, que também são rapidamente discutidos nesse capítulo. Embora exista a relação entre a condutância e a densidade espectral, estabelecemos um procedimento para obter diretamente a condutância em função da frequência, onde o parâmetro z , utilizado na discretização logarítmica, desempenha o papel fundamental de tornar possível a suavização do espectro de linhas discretas.

No capítulo 4, apresentamos resultados numéricos para a condutância DC em função do parâmetro ϵ_d , que está diretamente ligado ao potencial de gate. Também apresentamos resultados da condutância em função da frequência para dois diferentes conjuntos de parâmetros. O primeiro representa o caso simétrico, onde a defasagem no nível de Fermi é igual a $\frac{\pi}{2}$, nos conduzindo à máxima manifestação do efeito Kondo. O destaque fica para o ajuste do resultado numérico, no regime Kondo, por uma curva universal para a condutância, sendo que deste ajuste é possível extrair o valor da temperatura Kondo. O segundo representa um caso em que o estado fundamental da ilha é formado por uma mistura muito grande da ilha com 1 elétron com a ilha duplamente ocupada.

A obtenção da condutância em função da frequência, a $T = 0\text{K}$ e no regime de resposta linear, representa informação complementar a resultados para a condutância DC em função da tensão e da temperatura encontrados na literatura^{[24],[25],[26]}. Porém, é também possível calcular a condutância em função de todas estas variáveis utilizando-se o Grupo de Renormalização Numérico, sendo este, na verdade, o método mais preciso para o cálculo, de forma que tais extensões são naturais. O trabalho de Izumida et. al.^[12] é representativo neste sentido. Lá é utilizado o grupo de renormalização numérico para se fazer uma extensa análise da condutância DC no regime de resposta linear para diferentes formas de acoplamento dos reservatórios de elétrons ao "dot", que é considerado como tendo dois níveis de energia, bem como para diferentes temperaturas, onde podemos acompanhar a evolução da condutância desde temperaturas altas (em relação a T_K), onde o bloqueio Coulombiano domina, até temperaturas baixas, onde o efeito Kondo domina. No entanto, devemos salientar que o cálculo a $T = 0$ pode ser representativo de uma situação onde a temperatura Kondo seja bem maior que a temperatura de funcionamento do dispositivo e, uma vez que se esteja interessado em discutir o efeito Kondo neste dispositivo, ela não é uma limitação tão séria. Quantitativamente, a condutância diminui com a temperatura, porém esta diminuição é suave enquanto a temperatura for menor que T_K . Com relação à tensão aplicada no dispositivo que, em nossa abordagem, está representada pelo fluxo magnético através do anel, é importante superar a condição de resposta linear, pois há aspectos novos presentes quando a força eletromotriz é finita. A nossa abordagem para o problema, formulando-o em termos do anel e incorporando o potencial vetor em uma fase na taxa de tunelamento entre a ilha e os gases pode representar uma alternativa para o estudo dessa situação de não-equilíbrio, onde, normalmente, a aplicação de uma tensão V é incorporada ao modelo fazendo com que os potenciais químicos dos dois gases difiram de eV .

Outra extensão natural seria considerar a condutância através de duas ilhas, onde a possibilidade de diferentes configurações geométricas, como por exemplo, ilhas em série ou em paralelo, bem como a possibilidade de interação entre os elétrons de uma ilha com os elétrons da outra mediada pelos gases eletrônicos, enriquecem tremendamente a física do problema. Resultados para a susceptibilidade magnética e densidade espectral para o modelo de Anderson com duas impurezas têm sido obtidos em nosso grupo^{[27],[28]}, onde eles representam passos auxiliares na compreensão de ligas magnéticas não tão fracamente diluídas, como aquelas em que o modelo de uma impureza é capaz de propiciar entendimento satisfatório. Com o desenvolvimento da

nanofabricação, dispositivos com exatamente duas ilhas têm sido construídos e, desta forma, tais cálculos passam a descrevê-los completamente. Assim, vemos que o avanço tecnológico na construção de sistemas mesoscópicos injeta novo estímulo ao estudo do problema.

Apêndice A

Troca de t_j por $t_j e^{\pm i\phi}$ e Operador Corrente Elétrica

Neste apêndice justificamos as exponenciais $e^{\pm i\phi}$ que surgem no Hamiltoniano quando é aplicado o potencial vetor e também obteremos uma expressão conveniente para o operador corrente elétrica. Para o primeiro propósito, analisemos um Hamiltoniano escrito em primeira quantização na presença de um potencial vetor:

$$H = \sum_{\text{todas as partículas}} \left\{ \frac{\mathbf{P}_i^2}{2m} + \frac{q}{2mc} (\mathbf{P}_i \cdot \mathbf{A}(\mathbf{R}_i) + \mathbf{A}(\mathbf{R}_i) \cdot \mathbf{P}_i) + \frac{q^2}{2mc^2} \mathbf{A}^2 + V(\mathbf{R}_i) \right\} + U, \quad (1.1)$$

onde $V(\mathbf{r})$ representa um potencial externo qualquer e U representa a interação entre as partículas (que contêm carga q).

Seja $\chi(\mathbf{r}) = \int_{\mathbf{r}_0}^{\mathbf{r}} \mathbf{A}(\mathbf{r}) \cdot d\mathbf{r}$ e consideremos o seguinte operador

$$T_\chi = \exp\left(\sum_j \frac{iq}{\hbar c} \chi(\mathbf{R}_j)\right). \quad (1.2)$$

Se $|\psi\rangle$ é um autoestado de H com energia E , mostraremos que $T_\chi |\psi\rangle$ é um autoestado, com mesma energia E , do hamiltoniano com $\mathbf{A} = 0$. Para isto notemos que

$$[\mathbf{P}_i, T_\chi^{-1}] = -i\hbar \nabla T_\chi^{-1} = \frac{-q}{c} T_\chi^{-1} \mathbf{A}. \quad (1.3)$$

Da nossa afirmação sobre $|\psi\rangle$, temos

$$H|\psi\rangle = E|\psi\rangle, \quad (1.4)$$

que pode ser reescrita como

$$HT_\chi^{-1}|\psi\rangle = ET_\chi^{-1}|\psi\rangle, \quad (1.5)$$

e se levarmos em consideração a relação de comutação (1.3), a equação acima se transforma em

$$T_\chi^{-1}[(\sum_{\substack{\text{todas as} \\ \text{partículas}}} \{\frac{\mathbf{P}_i^2}{2m} + V(\mathbf{R}_i)\} + U)|\psi\rangle] = T_\chi^{-1}[E|\psi\rangle], \quad (1.6)$$

$$T_\chi^{-1}[(\sum_{\substack{\text{todas as} \\ \text{partículas}}} \{\frac{\mathbf{P}_i^2}{2m} + V(\mathbf{R}_i)\} + U)|\psi\rangle - E|\psi\rangle] = 0, \quad (1.7)$$

e como

$$|T_\chi^{-1}|\phi\rangle|^2 = \langle\phi|T_\chi T_\chi^{-1}|\phi\rangle = \langle\phi|\phi\rangle, \quad (1.8)$$

podemos concluir que

$$T_\chi^{-1}|\phi\rangle = 0 \Leftrightarrow |\phi\rangle = 0, \quad (1.9)$$

e portanto

$$[(\sum_{\substack{\text{todas as} \\ \text{partículas}}} \{\frac{\mathbf{P}_i^2}{2m} + V(\mathbf{R}_i)\} + U)|\psi\rangle] = E|\psi\rangle. \quad (1.10)$$

Devemos notar, no entanto, que $\langle\mathbf{r}|\psi\rangle$ é uma função de múltiplos valores na presença de um fluxo magnético no interior do anel, de modo que se formos nos restringir a dar uma volta, ela é uma função satisfazendo as condições torsionais de contorno: $\langle\mathbf{r}+1\text{volta}|\psi\rangle = e^{\frac{iq}{\hbar c}\Delta\chi(\mathbf{r})}\langle\mathbf{r}|\psi\rangle$, onde

$$\Delta\chi(\mathbf{r}) = \int_{\mathbf{r}}^{\mathbf{r}+1\text{volta}} \mathbf{A}(\mathbf{r}') \cdot d\mathbf{r}' = \text{fluxo de campo magnético através do anel} \quad (1.11)$$

Assim sendo, em segunda quantização, se uma combinação linear de estados da forma

$$a^\dagger(\phi_1)a^\dagger(\phi_2)a^\dagger(\phi_3)...a^\dagger(\phi_m)|\emptyset\rangle$$

(onde $a^\dagger(\phi_j)$ cria um elétron no estado $|\phi_j\rangle$, o qual representa o elétron no sítio j) é autoestado com energia E do Hamiltoniano do texto na presença do potencial vetor, então, a mesma combinação linear com estados da forma

$$a^\dagger(\phi'_1)a^\dagger(\phi'_2)a^\dagger(\phi'_3)...a^\dagger(\phi'_m)|\emptyset\rangle$$

onde

$$a^\dagger(\phi'_j) = \int d^3\mathbf{r} \langle \mathbf{r} | \phi_j \rangle e^{\frac{iq}{\hbar c}\chi(\mathbf{r})} a^\dagger(\mathbf{r}) \quad (1.12)$$

é autoestado do Hamiltoniano do texto na ausência de potencial vetor com a mesma energia, só que satisfazendo condições torsionais de contorno. Uma vez que $\langle \mathbf{r} | \phi_j \rangle$ representa uma função de onda muito localizada no sítio j , podemos escrever:

$$a^\dagger(\phi'_j) = e^{\frac{iq}{\hbar c}\chi(\mathbf{r}_j)} \int d^3\mathbf{r} \langle \mathbf{r} | \phi_j \rangle a^\dagger(\mathbf{r}) = e^{\frac{iq}{\hbar c}\chi(\mathbf{r}_j)} a^\dagger(\phi_j) = e^{i\frac{\theta}{N+1}j} a^\dagger(\phi_j) \quad (1.13)$$

Portanto, se escrevermos o Hamiltoniano do texto na presença de potencial vetor em termos dos operadores $a^\dagger(\phi'_j)$, ele deve voltar a ter a mesma forma de quando $\mathbf{A} = 0$, e para isto devemos introduzir as exponenciais $e^{\pm i\frac{\theta}{N+1}j}$ de tal forma que ela cancele as exponenciais que surgirão devido à transformação de operadores.

Para o segundo propósito, seguindo Kohn^[13], vamos considerar o Hamiltoniano escrito em primeira quantização:

$$\begin{aligned} H(\theta) &= \sum_i \frac{1}{2m} \left(p_i + \frac{eA(\theta)}{c} \right)^2 + V_i + U = \\ &= \sum_i \frac{1}{2m} \left(p_i + \frac{\hbar\theta}{L} \right)^2 + V_i + U. \end{aligned} \quad (1.14)$$

Derivando-o em relação a θ , teremos

$$\begin{aligned} \frac{dH}{d\theta} &= \frac{\hbar}{L} \sum_i \frac{1}{m} \left(p_i + \frac{\hbar\theta}{L} \right) = \frac{\hbar}{L} \sum_i \frac{1}{m} \left(p_i + \frac{eA(\theta)}{c} \right) \\ &= \frac{\hbar}{L} \sum_i v_i = -\frac{\hbar(-e)}{e} \frac{1}{L} (\text{num. de el.}) \langle v \rangle = -\frac{\hbar}{e} I, \end{aligned} \quad (1.15)$$

ou seja

$$I = -\frac{e}{\hbar} \frac{dH}{d\theta} \quad (1.16)$$

Apêndice B

Tridiagonalização da banda de condução

Vamos neste apêndice adaptar o método de Wilson^[4] para tridiagonalizar a banda de condução na presença do parâmetro de discretização z e no caso do operador f_o ser não uniforme. Permita-me esclarecer o significado desta não uniformidade. O estado $f_0^\dagger |\emptyset\rangle$ é o mais localizado em torno da impureza, e portanto, o mais estendido no espaço dos momenta, ou, no nosso caso, no espaço da variável ξ . Vamos dizer que f_o é uniforme se a densidade de probabilidade no espaço ξ é uniforme para um elétron no estado $f_0^\dagger |\emptyset\rangle$. Em termos da definição de f_o

$$\begin{aligned} f_0 &= \int_{-1}^1 \rho(\xi) C_{\xi,\sigma,a} d\xi \text{ ou, em termos de } a_n \text{ e } b_n : \\ f_0 &= \sum_{n=0}^{\infty} \sqrt{L_n} \rho_n (a_{n,\sigma,a}^\dagger + b_{n,\sigma,a}^\dagger), \\ &\text{onde } L_n \text{ é o tamanho do intervalo } I_n, \end{aligned}$$

ele será uniforme quando $\rho(\xi)$ (ou ρ_n) for constante, caso contrário, será não uniforme.

Em nosso caso ele é não uniforme com

$$\begin{aligned} \rho(\xi) &= \sqrt{\frac{\Gamma(\xi)}{\pi D}} \text{ e} \\ \rho_n &= \frac{1}{N_0} \int_{I_n^+} \frac{(1-\xi^2)^{\frac{1}{4}}}{\sqrt{2L_n}} d\xi \end{aligned} \tag{2.1}$$

onde

$$I_n^+ = \begin{cases} (\Lambda^{-z}, 1), & n = 0 \\ (\Lambda^{-n-z-1}, \Lambda^{-n-z}), & n = 1, 2, 3, \dots \end{cases}$$

$$L_n = \begin{cases} 1 - \Lambda^{-z}, & n = 0 \\ \Lambda^{-n-z}(1 - \Lambda^{-1}), & n = 1, 2, 3, \dots \end{cases}.$$

Esta não uniformidade provém da densidade de estados não uniforme e também da dependência com a energia da hibridização $V(\xi)$. No modelo utilizado por nós, a fonte destas não uniformidades está no ponto de partida, isto é, no Hamiltoniano tight-binding, que, ao ser escrito no espaço dos momenta, originou estas dependências com a energia.

Nossos coeficientes ϵ_n^z voltam aos de Wilson quando tomamos $z = 0$ ou $z = 1$ e consideramos f_0 uniforme.

Temos de escrever o Hamiltoniano da banda de condução (sem levar em consideração os índices de spin e de acoplado/desacoplado, aqui irrelevantes)

$$H_c = \sum_{n=0}^{\infty} E_n (a_n^\dagger a_n - b_n^\dagger b_n) \quad (2.2)$$

na forma tridiagonal

$$H_c = \sum_{n=0}^{\infty} \epsilon_n^z (f_n^\dagger f_{n+1} + f_{n+1}^\dagger f_n). \quad (2.3)$$

onde $E_n = \begin{cases} \frac{1+\Lambda^{-z}}{2}, & n = 0 \\ \frac{1+\Lambda^{-1}}{2} \Lambda^{-n-z+1}, & n \neq 0 \end{cases}.$

Existe uma transformação ortogonal relacionando os operadores f_n aos operadores a_n e b_n :

$$f_n = \sum_{m=0}^{\infty} u_{nm} a_m + v_{nm} b_m \quad (2.4)$$

$$a_m = \sum_{n=0}^{\infty} u_{nm} f_n \quad (2.5)$$

$$b_m = \sum_{n=0}^{\infty} v_{nm} f_n \quad (2.6)$$

O operador f_0 é conhecido, ou seja, conhecemos os coeficientes u_{0m} e v_{0m} , onde admitimos que ele esteja normalizado, isto é, $\sum_{m=0}^{\infty} (u_{0m}^2 + v_{0m}^2) = 1$. O procedimento baseia-se em substituírmos as equações (4) e (5) em (1) para, então igualá-la a (2).

Da substituição ficamos com

$$H_c = \sum_{m=0}^{\infty} E_m \left[\sum_{n,n'=0}^{\infty} u_{nm} u_{n'm} f_n^\dagger f_{n'} - \sum_{n,n'=0}^{\infty} v_{nm} v_{n'm} f_n^\dagger f_{n'} \right]$$

que pode ser escrita de forma a separar o operador f_k do restante:

$$\begin{aligned} H_c &= \sum_{m=0}^{\infty} E_m \left[\sum_{n=0}^{\infty} \sum_{n' \neq k}^{\infty} u_{nm} u_{n'm} f_n^\dagger f_{n'} - \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{n' \neq k}^{\infty} v_{nm} v_{n'm} f_n^\dagger f_{n'} \right] + \\ &\quad \sum_{m=0}^{\infty} E_m \left[\left(\sum_{n=0}^{\infty} u_{nm} f_n^\dagger \right) u_{km} - \left(\sum_{n=0}^{\infty} v_{nm} f_n^\dagger \right) v_{km} \right] f_k \\ &= \sum_{m=0}^{\infty} E_m \left[\sum_{n=0}^{\infty} \sum_{n' \neq k}^{\infty} u_{nm} u_{n'm} f_n^\dagger f_{n'} - \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{n' \neq k}^{\infty} v_{nm} v_{n'm} f_n^\dagger f_{n'} \right] + \\ &\quad \sum_{m=0}^{\infty} E_m [u_{km} a_m^\dagger - v_{km} b_m^\dagger] f_k \end{aligned}$$

e assim, ao igualarmos esta última equação com (2), teremos:

$$\sum_{m=0}^{\infty} E_m [u_{km} a_m^\dagger - v_{km} b_m^\dagger] = \epsilon_{k-1}^z f_{k-1}^\dagger + \epsilon_k^z f_{k+1}^\dagger$$

$$f_{k+1}^\dagger = \frac{1}{\epsilon_k^z} \left[\sum_{m=0}^{\infty} E_m [u_{km} a_m^\dagger - v_{km} b_m^\dagger] - \epsilon_{k-1}^z f_{k-1}^\dagger \right], \text{ para } k \neq 0 \text{ e} \quad (2.7)$$

$$f_1^\dagger = \frac{1}{\epsilon_0^z} \sum_{m=0}^{\infty} E_m [u_{0m} a_m^\dagger - v_{0m} b_m^\dagger] \quad (2.8)$$

Em (2.8) todos os coeficientes do lado direito são conhecidos, a menos de ϵ_0^z . Para determiná-lo impomos que $\{f_1^\dagger, f_1\} = 1$, o que nos leva a

$$(\epsilon_0^z)^2 = 2 \sum_{m=0}^{\infty} E_m^2 u_{0m}^2 \quad (2.9)$$

e assim determinamos ϵ_0^z e

$$u_{1m} = -v_{1m} = \frac{E_m}{\epsilon_0^z} u_{0m} \quad (2.10)$$

Agora passamos a $k = 1$ na equação (2.7) e encontraremos:

$$f_2^\dagger = \frac{1}{\epsilon_1^z} \left[\sum_{m=0}^{\infty} E_m [u_{1m} a_m^\dagger - v_{1m} b_m^\dagger] - \epsilon_0^z f_0^\dagger \right] \quad (2.11)$$

e impondo a normalização:

$$(\epsilon_1^z)^2 = (\epsilon_0^z)^2 + \frac{2}{(\epsilon_0^z)^2} \sum_{m=0}^{\infty} (E_m^2 u_{0m})^2 - 4 \sum_{m=0}^{\infty} E_m^2 u_{0m}^2 \quad (2.12)$$

e assim

$$u_{2m} = v_{2m} = \left(-\frac{\epsilon_0^z}{\epsilon_1^z} + \frac{E_m^2}{\epsilon_0^z \epsilon_1^z} \right) u_{0m} \quad (2.13)$$

e seguindo desta maneira podemos ir determinando todos os coeficientes.

Podemos estabelecer relações de recorrência:

$$(\epsilon_n^z)^2 = (\epsilon_{n-1}^z)^2 + 2 \sum_{m=0}^{\infty} E_m^2 u_{nm}^2 - 4 \epsilon_{n-1}^z \sum_{m=0}^{\infty} E_m u_{nm} u_{n-1,m} \quad (2.14)$$

$$u_{nm} = -\frac{\epsilon_{n-2}^z}{\epsilon_{n-1}^z} u_{n-2,m} + \frac{E_m}{\epsilon_{n-1}^z} u_{n-1,m} \quad (2.15)$$

$$v_{nm} = (-1)^{-1} u_{nm} \quad (2.16)$$

Vemos que todos os coeficientes u_{nm} e v_{nm} são proporcionais ao coeficiente u_{0m} , onde o coeficiente de proporcionalidade é um polinômio de grau n em E_m ,

$$u_{nm} = P_n(E_m) u_{0m} \quad (2.17)$$

e pela equação (2.15) estes polinômios satisfazem a relação de recorrência

$$P_n = -\frac{\epsilon_{n-2}^z}{\epsilon_{n-1}^z} P_{n-2} + \frac{E_m}{\epsilon_{n-1}^z} P_{n-1} \quad (2.18)$$

Estes polinômios são tais que os de grau ímpar possuem apenas potências ímpares de E_m e os de grau par apenas potências pares. Muito provavelmente são ortogonais e devem estar estreitamente relacionados com polinômios que surgem quando se utiliza outro método para a tridiagonalização como na Ref. [27], mas nós não investigaremos esta questão aqui.

Vamos agora sistematizar o cálculo dos coeficientes codiagonais (ϵ_n^z). Se calculamos todos

os coeficientes até ϵ_n^z e todos os polinômios até P_{n-1} , podemos determinar

$$P_n = \sum_{p=0}^n \alpha_{n,p} E_m^p$$

e assim calcular os coeficientes do polinômio

$$E_m^2(P_n)^2 = \sum_{p=0}^{2n+2} prod1_{n,p} E_m^p$$

e do polinômio

$$E_m P_n P_{n-1} = \sum_{p=0}^{2n} prod2_{n,p} E_m^p$$

que aparecem dentro dos somatórios na equação (2.14), agora reescrita da seguinte forma:

$$\begin{aligned} (\epsilon_n^z)^2 &= (\epsilon_{n-1}^z)^2 + 2 \sum_{p=0}^{2n+2} prod1_{n,p} \left[\sum_{m=0}^{\infty} (E_m)^p (u_{0m})^2 \right] - \\ &- 4\epsilon_{n-1}^z \sum_{p=0}^{2n} prod2_{n,p} \left[\sum_{m=0}^{\infty} (E_m)^p (u_{0m})^2 \right] \end{aligned} \quad (2.19)$$

Se definirmos

$$S_p = \sum_{m=0}^{\infty} (E_m)^p (u_{0m})^2 \quad (2.20)$$

ficamos com

$$(\epsilon_n^z)^2 = (\epsilon_{n-1}^z)^2 + 2 \sum_{p=0}^{2n+2} prod1_{n,p} S_p - 4\epsilon_{n-1}^z \sum_{p=0}^{2n} prod2_{n,p} S_p \quad (2.21)$$

e é esta a expressão utilizada para o cálculo de ϵ_n^z . Claro que escrita desta forma, ela esconde o problema de calcularmos as somas S_p . No caso do artigo de Wilson^[4], esta soma era simplesmente a soma de uma progressão geométrica e podia ser determinada imediatamente. Se o operador f_o fosse uniforme, mesmo com z , teríamos também somas de progressão geométrica e a avaliação de S_p não seria problema. A única diferença entre este caso e o de Wilson, é que lá ele conseguiu determinar uma expressão direta para ϵ_n , sem necessidade de utilizar a relação de recorrência, sendo que aqui, não conseguimos tal expressão.

Mesmo no caso não uniforme, as séries S_p são rapidamente convergentes, e na implementação

numérica somar os 30 primeiros termos da série é folgadoamente suficiente em termos de precisão, de forma que as somas S_p definitivamente não representam problema.

Para o cálculo numérico, no entanto, temos de recorrer ao software Maple, que é capaz de trabalhar com um número de dígitos decimais arbitrário, e a dificuldade surge porque os coeficientes dos polinômios P_n crescem rapidamente com n , de modo que durante o cálculo numérico teremos de estar subtraindo números muito grandes para obter números da ordem de 1. Em resumo, coeficientes com $n > 7$ já não podem ser obtidos através de um programa que trabalhe apenas com a precisão dupla, e é crucial a utilização do Maple. Por outro lado, verificamos numericamente que os coeficientes para $n \gg 1$ tem um comportamento dado pela expressão assintótica

$$\frac{1 + \Lambda^{-1}}{2} \Lambda^{1-z-n/2} \quad (2.22)$$

de modo que para $n > 20$, utilizamos esta expressão para determiná-los.

A seguir apresentamos duas tabelas, a primeira para o nosso caso onde f_0 é não uniforme e a segunda com f_0 uniforme, para mostrar o comportamento de $\xi_n^z = \frac{2}{1+\Lambda^{-1}} \Lambda^{n/2} \epsilon_n^z$ com n . Por (2.22) $\lim_{n \rightarrow \infty} \xi_n^z = \Lambda^{1-z}$, e isto é facilmente observados nestas tabelas, onde $\Lambda = 5$ e $z = 0.5$.

n	ξ_n^z
1	0.855499882408246
2	1.687229436455950
3	2.724342050565914
4	2.602636534808710
5	2.302288647792545
6	2.246665751926793
7	2.238088588910206
8	2.236468897097816
9	2.236148039294882
10	2.236083985013670
11	2.236071178809066
12	2.236068617753907
13	2.236068105550303
14	2.236068003109880
15	2.236067982621807
16	2.236067978524193
17	2.236067977704670
18	2.236067977540765
19	2.236067977507985
20	2.236067977501427

n	ξ_n^z
1	0.936022851289524
2	1.540973587669370
3	2.505025267327714
4	2.508408343899544
5	2.288840004961326
6	2.244745779343497
7	2.237729095281468
8	2.236397740834853
9	2.236133836023142
10	2.236081145467498
11	2.236070610944074
12	2.236068504182678
13	2.236068082836128
14	2.236067998567048
15	2.236067981713241
16	2.236067978342479
17	2.236067977668328
18	2.236067977533497
19	2.236067977506532
20	2.236067977501136

Apêndice C

Operadores de Spin em segunda quantização

Neste apêndice apenas listamos os operadores de spin em segunda quantização para eventual consulta.

$$S_{z_N} = \frac{1}{2} \sum_{n=0}^N (f_{n,\uparrow}^\dagger f_{n,\uparrow} - f_{n,\downarrow}^\dagger f_{n,\downarrow}) + \frac{1}{2} (c_{n,\uparrow}^\dagger c_{n,\uparrow} - c_{n,\downarrow}^\dagger c_{n,\downarrow}) \quad (3.1)$$

$$S_{x_N} = \frac{1}{2} \sum_{n=0}^N (f_{n,\uparrow}^\dagger f_{n,\downarrow} + f_{n,\downarrow}^\dagger f_{n,\uparrow}) + \frac{1}{2} (c_{n,\uparrow}^\dagger c_{n,\downarrow} + c_{n,\downarrow}^\dagger c_{n,\uparrow}) \quad (3.2)$$

$$S_{y_N} = \frac{-i}{2} \sum_{n=0}^N (f_{n,\uparrow}^\dagger f_{n,\downarrow} - f_{n,\downarrow}^\dagger f_{n,\uparrow}) - \frac{i}{2} (c_{n,\uparrow}^\dagger c_{n,\downarrow} - c_{n,\downarrow}^\dagger c_{n,\uparrow}) \quad (3.3)$$

$$S_N^+ = \sum_{n=0}^N f_{n,\uparrow}^\dagger f_{n,\downarrow} + c_{n,\uparrow}^\dagger c_{n,\downarrow} \quad (3.4)$$

$$S_N^- = \sum_{n=0}^N f_{n,\downarrow}^\dagger f_{n,\uparrow} + c_{n,\downarrow}^\dagger c_{n,\uparrow} \quad (3.5)$$

$$\begin{aligned} S_{N+1}^2 &= S_N^2 + f_{N+1,\uparrow}^\dagger f_{N+1,\downarrow} S_N^- + f_{N+1,\downarrow}^\dagger f_{N+1,\uparrow} S_N^+ + \\ &\quad (f_{N+1,\uparrow}^\dagger f_{N+1,\uparrow} - f_{N+1,\downarrow}^\dagger f_{N+1,\downarrow}) S_{z_N} + \\ &\quad \frac{3}{4} (f_{N+1,\uparrow}^\dagger f_{N+1,\uparrow} + f_{N+1,\downarrow}^\dagger f_{N+1,\downarrow}) - \frac{3}{2} f_{N+1,\uparrow}^\dagger f_{N+1,\downarrow}^\dagger f_{N+1,\downarrow} f_{N+1,\uparrow} \end{aligned} \quad (3.6)$$

Apêndice D

Relações de recorrência para os elementos de matriz invariantes do operador c_0

Vamos aqui apresentar a demonstração das relações de recorrência (3.57) e (3.58). Inicialmente consideremos o elemento de matriz $_{N+1} \langle Q, S, S_z, R | c_{d,\uparrow} | Q+1, S-\frac{1}{2}, S_z+\frac{1}{2}, R' \rangle_{N+1}$ escrito em termos do vetores da base na qual a matriz H_{N+1} foi escrita:

$$\begin{aligned}
 & \left\langle Q, S, S_z, R | c_{d,\uparrow} | Q+1, S-\frac{1}{2}, S_z+\frac{1}{2}, R' \right\rangle \\
 &= \sum_{\substack{r,j \\ r',j'}} U_{Q,S}^{(R,r,j)} U_{Q+1,S-\frac{1}{2}}^{(R',r',j')} \left\langle Q, S, S_z, r, j | c_{d,\uparrow} | Q+1, S-\frac{1}{2}, S_z+\frac{1}{2}, r', j' \right\rangle_{N+1} \\
 &\Rightarrow \left\langle Q, S, R || c_d || Q+1, S-\frac{1}{2}, R' \right\rangle \\
 &= \sum_{\substack{r,j \\ r',j'}} U_{Q,S}^{(R,r,j)} U_{Q+1,S-\frac{1}{2}}^{(R',r',j')} \left\langle Q, S, r, j || c_d || Q+1, S-\frac{1}{2}, r', j' \right\rangle_{N+1} \text{ visto que } (4.1)
 \end{aligned}$$

os coeficientes de Clebsch-Gordan são os mesmos do dois lados da igualdade. Portanto, analisemos os elementos de matriz invariantes para os vetores da base. Inicialmente notemos que as

únicas possibilidades para eles serem não nulos são

$$\begin{aligned}
 j &= 1 \text{ e } j' = 1 \\
 j &= 2 \text{ e } j' = 2 \\
 j &= 2 \text{ e } j' = 3 \\
 j &= 3 \text{ e } j' = 2 \\
 j &= 3 \text{ e } j' = 3 \\
 j &= 4 \text{ e } j' = 4.
 \end{aligned}$$

Investiguemos cada uma delas.

1. $j = 1$ e $j' = 1$:

$$\begin{aligned}
 & {}_{N+1} \left\langle Q, S, r, 1 \parallel c_d \parallel Q + 1, S - \frac{1}{2}, r', 1 \right\rangle_{N+1} \sqrt{\frac{S - S_z}{2S}} \\
 &= {}_{N+1} \left\langle Q, S, S_z, r, 1 \parallel c_{d,\uparrow} \parallel Q + 1, S - \frac{1}{2}, S_z + \frac{1}{2}, r', 1 \right\rangle_{N+1} \\
 &= {}_N \left\langle Q + 1, S, S_z, r \parallel c_{d,\uparrow} \parallel Q + 2, S - \frac{1}{2}, S_z + \frac{1}{2}, r' \right\rangle_N \\
 &= {}_N \left\langle Q + 1, S, r \parallel c_d \parallel Q + 2, S - \frac{1}{2}, r' \right\rangle_N \sqrt{\frac{S - S_z}{2S}},
 \end{aligned}$$

portanto

$$\begin{aligned}
 & {}_{N+1} \left\langle Q, S, r, 1 \parallel c_d \parallel Q + 1, S - \frac{1}{2}, r', 1 \right\rangle_{N+1} \\
 &= {}_N \left\langle Q + 1, S, r \parallel c_d \parallel Q + 2, S - \frac{1}{2}, r' \right\rangle_N.
 \end{aligned} \tag{4.2}$$

2. $j = 4$ e $j' = 4$:

$$\begin{aligned}
 & {}_{N+1} \left\langle Q, S, r, 4 \parallel c_d \parallel Q + 1, S - \frac{1}{2}, r', 4 \right\rangle_{N+1} \sqrt{\frac{S - S_z}{2S}} \\
 &= {}_{N+1} \left\langle Q, S, S_z, r, 4 \parallel c_{d,\uparrow} \parallel Q + 1, S - \frac{1}{2}, S_z + \frac{1}{2}, r', 4 \right\rangle_{N+1} \\
 &= {}_N \left\langle Q - 1, S, S_z, r \parallel c_{d,\uparrow} \parallel Q, S - \frac{1}{2}, S_z + \frac{1}{2}, r' \right\rangle_N \\
 &= {}_N \left\langle Q - 1, S, r \parallel c_d \parallel Q, S - \frac{1}{2}, r' \right\rangle_N \sqrt{\frac{S - S_z}{2S}},
 \end{aligned}$$

portanto

$$\begin{aligned}
 & {}_{N+1} \left\langle Q, S, r, 4 \parallel c_d \parallel Q + 1, S - \frac{1}{2}, r', 4 \right\rangle_{N+1} \\
 &= {}_N \left\langle Q - 1, S, r \parallel c_d \parallel Q, S - \frac{1}{2}, r' \right\rangle_N.
 \end{aligned} \tag{4.3}$$

3. $j = 2$ e $j' = 2$:

$$\begin{aligned}
& {}_{N+1} \left\langle Q, S, r, 2 \| c_d \| Q + 1, S - \frac{1}{2}, r', 2 \right\rangle_{N+1} \sqrt{\frac{S - S_z}{2S}} \\
&= {}_{N+1} \left\langle Q, S, S_z, r, 2 | c_{d,\uparrow} | Q + 1, S - \frac{1}{2}, S_z + \frac{1}{2}, r', 2 \right\rangle_{N+1} \\
&= -\sqrt{\frac{S+S_z}{2S}} \sqrt{\frac{S+S_z}{2S-1}} {}_N \left\langle Q, S - \frac{1}{2}, S_z - \frac{1}{2}, r | c_{d,\uparrow} | Q + 1, S - 1, S_z, r' \right\rangle_N \\
&\quad - \sqrt{\frac{S-S_z}{2S}} \sqrt{\frac{S-S_z-1}{2S-1}} {}_N \left\langle Q, S - \frac{1}{2}, S_z + \frac{1}{2}, r | c_{d,\uparrow} | Q + 1, S - 1, S_z + 1, r' \right\rangle_N \\
&- \left[\sqrt{\frac{S+S_z}{2S}} \sqrt{\frac{S+S_z}{2S-1}} \sqrt{\frac{S-S_z}{2S-1}} + \sqrt{\frac{S-S_z}{2S}} \sqrt{\frac{S-S_z-1}{2S-1}} \sqrt{\frac{S-S_z-1}{2S-1}} \right] {}_N \left\langle Q, S - \frac{1}{2}, r \| c_d \| Q + 1, S - 1, r' \right\rangle_N \\
&= -\sqrt{\frac{S-S_z}{2S}} {}_N \left\langle Q, S - \frac{1}{2}, r \| c_d \| Q + 1, S - 1, r' \right\rangle_N,
\end{aligned}$$

portanto

$$\begin{aligned}
& {}_{N+1} \left\langle Q, S, r, 2 \| c_d \| Q + 1, S - \frac{1}{2}, r', 2 \right\rangle_{N+1} \\
&= -{}_N \left\langle Q, S - \frac{1}{2}, r \| c_d \| Q + 1, S - 1, r' \right\rangle_N.
\end{aligned} \tag{4.4}$$

3. $j = 3$ e $j' = 3$:

$$\begin{aligned}
& {}_{N+1} \left\langle Q, S, r, 3 \| c_d \| Q + 1, S - \frac{1}{2}, r', 3 \right\rangle_{N+1} \sqrt{\frac{S - S_z}{2S}} \\
&= {}_{N+1} \left\langle Q, S, S_z, r, 3 | c_{d,\uparrow} | Q + 1, S - \frac{1}{2}, S_z + \frac{1}{2}, r', 3 \right\rangle_{N+1} \\
&= -\sqrt{\frac{S-S_z+1}{2S+2}} \sqrt{\frac{S-S_z}{2S+1}} {}_N \left\langle Q, S + \frac{1}{2}, S_z - \frac{1}{2}, r | c_{d,\uparrow} | Q + 1, S, S_z, r' \right\rangle_N \\
&\quad - \sqrt{\frac{S+S_z+1}{2S+2}} \sqrt{\frac{S+S_z+1}{2S+1}} {}_N \left\langle Q, S + \frac{1}{2}, S_z + \frac{1}{2}, r | c_{d,\uparrow} | Q + 1, S, S_z + 1, r' \right\rangle_N \\
&- \left[\sqrt{\frac{S-S_z+1}{2S+2}} \sqrt{\frac{S-S_z}{2S+1}} \sqrt{\frac{S-S_z+1}{2S+1}} + \sqrt{\frac{S+S_z+1}{2S+2}} \sqrt{\frac{S+S_z+1}{2S+1}} \sqrt{\frac{S-S_z}{2S+1}} \right] {}_N \left\langle Q, S + \frac{1}{2}, r \| c_d \| Q + 1, S, r' \right\rangle_N \\
&= -\sqrt{\frac{S-S_z}{2S+2}} {}_N \left\langle Q, S + \frac{1}{2}, r \| c_d \| Q + 1, S, r' \right\rangle_N,
\end{aligned}$$

portanto

$$\begin{aligned}
& {}_{N+1} \left\langle Q, S, r, 3 \| c_d \| Q + 1, S - \frac{1}{2}, r', 3 \right\rangle_{N+1} \\
&= -\frac{\sqrt{2S(2S+2)}}{2S+1} {}_N \left\langle Q, S + \frac{1}{2}, r \| c_d \| Q + 1, S, r' \right\rangle_N
\end{aligned} \tag{4.5}$$

5. $j = 2$ e $j' = 3$:

$$\begin{aligned}
& {}_{N+1} \left\langle Q, S, r, 2 || c_d || Q + 1, S - \frac{1}{2}, r', 3 \right\rangle_{N+1} \sqrt{\frac{S - S_z}{2S}} \\
& \quad = {}_{N+1} \left\langle Q, S, S_z, r, 2 | c_{d,\uparrow} | Q + 1, S - \frac{1}{2}, S_z + \frac{1}{2}, r', 3 \right\rangle_{N+1} \\
& \quad = + \sqrt{\frac{S+S_z}{2S}} \sqrt{\frac{S-S_z}{2S+1}} {}_N \left\langle Q, S - \frac{1}{2}, S_z - \frac{1}{2}, r | c_{d,\uparrow} | Q + 1, S, S_z, r' \right\rangle_N \\
& \quad \quad - \sqrt{\frac{S-S_z}{2S}} \sqrt{\frac{S+S_z+1}{2S+1}} {}_N \left\langle Q, S - \frac{1}{2}, S_z + \frac{1}{2}, r | c_{d,\uparrow} | Q + 1, S, S_z + 1, r' \right\rangle_N \\
& = \left[\sqrt{\frac{S+S_z}{2S}} \sqrt{\frac{S-S_z}{2S+1}} \sqrt{\frac{S+S_z}{2S+1}} - \sqrt{\frac{S-S_z}{2S}} \sqrt{\frac{S+S_z+1}{2S+1}} \sqrt{\frac{S+S_z+1}{2S+1}} \right] {}_N \left\langle Q, S - \frac{1}{2}, r || c_d || Q + 1, S, r' \right\rangle_N \\
& \quad = - \sqrt{\frac{S-S_z}{2S}} \frac{1}{2S+1} {}_N \left\langle Q, S - \frac{1}{2}, r || c_d || Q + 1, S, r' \right\rangle_N
\end{aligned}$$

portanto

$$\begin{aligned}
& {}_{N+1} \left\langle Q, S, r, 2 || c_d || Q + 1, S - \frac{1}{2}, r', 3 \right\rangle_{N+1} \\
& = - \frac{1}{2S+1} {}_N \left\langle Q, S - \frac{1}{2}, r || c_d || Q + 1, S, r' \right\rangle_N. \tag{4.6}
\end{aligned}$$

6. $j = 3$ e $j' = 2$:

$$\begin{aligned}
& {}_{N+1} \left\langle Q, S, S_z, r, 3 | c_{d,\uparrow} | Q + 1, S - \frac{1}{2}, S_z + \frac{1}{2}, r', 2 \right\rangle_{N+1} \\
& \quad = \alpha {}_N \left\langle Q, S + \frac{1}{2}, S_z - \frac{1}{2}, r | c_{d,\uparrow} | Q + 1, S - 1, S_z, r' \right\rangle_N \\
& \quad + \beta {}_N \left\langle Q, S + \frac{1}{2}, S_z + \frac{1}{2}, r | c_{d,\uparrow} | Q + 1, S - 1, S_z + 1, r' \right\rangle_N \\
& \quad = 0,
\end{aligned}$$

pois o módulo da diferença entre os valores de J no bra e no ket é maior que $\frac{1}{2}$.

Substituindo estes resultados na Eq. (4.1), obtemos a relação (3.57) do texto. A relação (3.58) do texto é determinada da mesma forma.

Bibliografia

- [1] IMRY, Y. *Introduction to Mesoscopic Physics*. Nova Iorque, Oxford University Press, 1997.
- [2] NG, T. K.; LEE, P. A. On-Site Coulom Repulsion and Resonant Tunneling. *Phys. Rev. Lett.*, v.61, n.15, p.1768-1771, 1988.
- [3] KONDO, J. Resistance Minimum in Diluted Magnetic Alloys. *Progress of Theoretical Physics*, v.32, n.01, p.37-49, 1964.
- [4] WILSON, K. G. The renormalization group: Critical phenomena and the Kondo problem. *Reviews of Modern Physics*, v.47, n.04, p.773-840, 1975.
- [5] LEE, P. A. Few electron nanostructures: a laboratory for studying strongly interacting systems. *Physica B*, v.189, p.1-5, 1993.
- [6] KRISHNA-MURTHY, H. R.; WILKINS, J. W.; WILSON, K. G. Renormalization-group approach to the Anderson model of diluted magnetic alloys. I. Static properties for the symmetric case. *Phys. Rev. B*, v.21, n.03, p.1003-1043, 1980.
- [7] KRISHNA-MURTHY, H. R.; WILKINS, J. W.; WILSON, K. G. Renormalization-group approach to the Anderson model of diluted magnetic alloys. II. Static properties for the asymmetric case. *Phys. Rev. B*, v.21, n.03, p.1044-1083, 1980.
- [8] GOLDHABER-GORDON, D. et al. Kondo effect in a single-electron transistor. *Nature*, v.391, p.156-159, 1998.
- [9] INOSHITA, T. Kondo Effect in Quantum Dots. *Science*, v.281, p.526-527.
- [10] ANDERSON, P. W. Localized Magnetic States in Metals. *Physical Review*, v.124, n.01, p.41-53, 1961.

- [11] DAVIDOVICH, M. A. et al. Bohm-Aharonov and Kondo effects on tunneling currents in a mesoscopic ring. *Phys. Rev. B*, v.55, n.12, p.7335-7338.
- [12] IZUMIDA, W.; SAKAI, O.; SHIMIZU, Y. Kondo effect in single quantum dot systems – Study with Numerical Renormalization Group Method. *Journal of the Physical Society of Japan*, v.67, n.7, p.2444-2454, 1998.
- [13] KOHN, W. Theory of the Insulating State. *Physical Review*, v.133, n.1A, p.171-181, 1964.
- [14] SHASTRY, B. S.; SUTHERLAND, B. Twisted Boundary Conditions and Effective Mass in Heisenberg-Ising and Hubbard Rings. *Phys. Rev. Lett.*, v.65, n.2, p.243-246, 1990.
- [15] FROTA, H. O.; OLIVEIRA, L. N. Photoemission spectroscopy for the spin-degenerate Anderson model. *Physical Review B*, v.33, n.11, p. 7871-7873, 1986.
- [16] MAHAN, G. D. Many Particle Physics. Nova Iorque, Plenum Press, 1981.
- [17] COSTA, S. C. et al. *Physical Review B*, v.55, n.30, 1997.
- [18] SCHRIEFFER, J. R.; WOLF, P. A. *Physical Review*, v.149, n.415, p.491-492, 1966.
- [19] GOTTFRIED, K. *Quantum Mechanics Vol. I* 4.ed. The Benjamin/Cummings Publishing Company INC., 1974, Cap. VII, seção 49.
- [20] YOSHIDA, M.; WHITAKER, M. A.; OLIVEIRA, L. N. Renormalization-Group Calculation of Excitation Properties of Impurity Models, *Phys. Rev. B*, vol.41, n.13, p.9403-9414, 1990.
- [21] MESSIAH, A. *Quantum Mechanics vol. 2*, Amsterdã, North-Holland Publishing Company, 1961, Cap. XIII, seção VI.
- [22] HEWSON, A. C.; *The Kondo Problem to Heavy Fermions*. Cambridge University Press, 1993.
- [23] LANGRETH, D. C.; Friedel Sum Rule for Anderson's Model of Localized Impurity States, *Physical Review*, vol.150, n.2, p.516-518, 1966.

- [24] HERSHFELD, S., DAVIES, J. H., WILKINS, J. W.; Probing the Kondo Resonance by Resonant Tunneling through an Anderson Impurity, *Phys. Rev. Lett.*, vol.67, n.26, p.3720-3723, 1991.
- [25] HETTLER, M. H., KROHA, J., HERSHFELD, S.; Nonlinear Conductance for the Two Channel Anderson Model, *Phys. Rev. Lett.*, vol.73, n.14, p.1967-1970, 1994.
- [26] MEIR, Y., WINGREEN, N. S., LEE, P. A.; Low-Temperature Transport Through a Quantum Dot: The Anderson Model out of Equilibrium, *Phys. Rev. Lett.*, vol.70, n.17, p.2601-2604, 1993.
- [27] LIMA, W. L. C.; Assimetria partícula-buraco no modelo de Kondo de duas impurezas. Tese de Doutorado, Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo, 1997.
- [28] PAULA, C. A.; Densidade espectral do modelo de Anderson de duas impurezas. Tese de Doutorado, Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo, 1998.
- [29] OLIVEIRA, L. N., WILKINS, J. W.; Specific heat of the Kondo model, *Phys. Rev. Lett.*, vol.47, n.21, p.1553-1556, 1981.