

INSTITUTO DE FÍSICA
Universidade Federal Fluminense

Víctor Leonardo Fernández Becerra

**Método atômico para o modelo de Anderson em presença de um
campo magnético externo**

Niterói - Rio de Janeiro.

2011

Víctor Leonardo Fernández Becerra

**Método atômico para o modelo de Anderson em presença de um
campo magnético externo**

Dissertação apresentada ao curso de Pós-Graduação em Física da Universidade Federal Fluminense, como requisito parcial para a obtenção do Título de Mestre em Física.

Orientador:

Prof. Dr. Marcos Sergio Figueira

Niterói

2011

Agradecimientos:

A mi madre, quién es la representación de Dios en este complejo mundo 4-dimensional y a mi padre quién con sabiduría ha sido mi guía en todo este proceso.

A mis hermanos y sus familias, especialmente mis sobrinos Juan David, Isabel Sofia, Gustavo Adolfo y Maria de los Angeles, por su continuo respaldo y por haber creído en mi.

A mi orientador, Marcos Sérgio Figueira: por su paciencia al orientarme y por ayudarme en la ardua tarea de la escritura de la tesis. Le estoy inmensamente agradecido por lo que le aprendí tanto en el plano académico como en el personal.

A los profesores del instituto de física con quién tuve la fortuna de discutir temas muy interesantes tanto en aulas como fuera de ellas. Sólo por nombrar algunos de ellos, Luis Oxman, Jürgen Fritz, Caio Lewenkopf, Thadeu Penna y el profesor Mario Foglio de la UNICAMP por las valiosas discusiones.

A mis amigos colombianos: William, Sandra, Francisco, Omaira, Enrique, Wilmar, Juliana, Maribel y Carolina, y a mi infinita lista de amigos brasileños con quienes aprendí el poco portugués que sé: Vladimir, Orahcio, Bruno, Aline, Mônica, Dinola, Alvaro, Daiara, Ingrid, Alexandre, Cadu, Ana Saba, Cris Salles, Denise, Linda, Luciana, Carlos, Odilon, Os Thiago's, Karen, Luci e Jeannie. También estoy muy agradecido con mi amiga Mexicana Maria Florencia Noriega Romero Vargas por su valiosa amistad.

Al comité del posgrado: profesores Antonio Zelaquett, Andréa Latgé, Thadeu Penna e Fabio Reis por el respaldo en los diferentes procesos académicos y burocráticos.

A los funcionarios del posgrado: Rafael y Valeria, y los funcionarios de la biblioteca: Karen, Ana, Stephanie, Luci e Danieli.

Al CNPq y la FAPERJ por el financiamiento.

Resumo

Desenvolvemos o método atômico para o modelo de Anderson em presença de um campo magnético externo aplicado. A função de Green que representa a solução exata do problema da impureza pode sempre ser expressa em termos de um cumulante efetivo, que no método atômico, é substituído pelo cumulante atômico obtido a partir da função de Green atômica, quando a banda dos elétrons de condução é colapsada em dois níveis localizados, dependentes do spin $\xi_{q\sigma}$ e que correspondem aos canais de spin para baixo e spin para cima. Assim o problema tem dois parâmetros livres $\xi_{q\sigma}$, um para cada canal de spin e que devem ser calculados autoconsistentemente, de modo a satisfazer a regra de soma de Friedel generalizada, que leva em conta o campo magnético \vec{B} .

O cálculo destes parâmetros permite a obtenção da função de Green aproximada para o problema da impureza de Anderson, e as densidades de estado dependentes do campo magnético \vec{B} . A partir destes resultados, calculamos o desdobramento do pico de Kondo e comparamos com resultados similares obtidos anteriormente, usando o grupo de renormalização numérico. Também obtivemos resultados com o método atômico para o deslocamento de fase e a magnetização em função do campo magnético aplicado. Esses resultados foram comparados com resultados similares obtidos com a solução exata do Ansatz de Bethe para o modelo de Kondo. No regime de Kondo, a concordância é muito boa, porém para a transição do regime Kondo para o regime de valência intermediária os resultados diferem da solução exata devido a existência de flutuações de carga presentes no modelo de Anderson e ausentes no modelo de Kondo.

Como uma aplicação em transporte, calculamos a condutância de um ponto quântico imerso num canal balístico e fizemos a generalização do método para a rede de Anderson.

Palavras-chaves: *Ponto quântico, modelo de Anderson, efeito Kondo*

Abstract

We develop the atomic method (AM) for the Anderson impurity model under an external magnetic field. The Green's functions (GF) representing the exact solution of the impurity problem is written in terms of an effective cumulant, that in the atomic method is replaced by the atomic cumulant obtained from the atomic Green function. In the atomic model the conduction band is collapsed into two localized levels, everyone depending on spin $\xi_{q\sigma}$ and related to the spin up and down channels. Therefore, the problem is parametrized by $\xi_{q\uparrow(\downarrow)}$, and every spin channel need to be found self consistently in a way that a generalized Friedel sum rule, that takes into account the magnetic field \vec{B} , must be satisfied.

The calculation of the parameters mentioned above allow us to obtain the approximate GF of the impurity Anderson model, and the spectral densities depending on the magnetic field \vec{B} . From these results, we calculate the Kondo splitting and compare it with similar results obtained previously within the numerical renormalization group method. We also obtain results within the atomic method for the phase shift and magnetization as a function of the magnetic field. These results were compared with those obtained by means of the Bethe ansatz (BA) for the Kondo model. In the Kondo regime the agreement between the BA and the AM is good, however in the boundary between the Kondo and the mixed valence regime the results differ because the charge fluctuations in the Anderson model become important.

As an application in transport theory, we calculate the conductance of a quantum dot immersed into a ballistic channel and we generalize the method to the periodic case.

Keywords: *Quantum dot, Anderson model, Kondo effect*

Sumário

Lista de Figuras	p. vi
1 Introdução	p. 1
1.1 Impurezas magnéticas num metal	p. 1
1.2 Pontos quânticos e os “single electron transistor’s” SET’s	p. 5
1.3 A rede de Anderson	p. 9
2 Teoria e modelos	p. 12
2.1 Explicação de Kondo do mínimo da resistividade	p. 12
2.2 O modelo de Anderson de uma impureza	p. 16
2.3 O limite de U infinito	p. 18
2.4 O método da equação de movimento	p. 20
2.5 Expansão em cumulantes	p. 21
2.6 Ressonância e deslocamento de fase	p. 27
2.7 A regra da soma de Friedel	p. 30
3 Método atômico	p. 33
3.1 O método atômico para a impureza de Anderson	p. 33
3.2 Solução Atômica	p. 36
4 Resultados	p. 45
4.1 O modelo da impureza de Anderson	p. 45
4.2 O Ansatz de Bethe	p. 47
4.3 Condutância de um SET	p. 56

4.4	O modelo de Anderson periódico	p. 63
5	Conclusões e perspectivas	p. 66
	Referências Bibliográficas	p. 68

Lista de Figuras

- 1.1 Baseado no artigo de Sarachik (1) se apresentam medidas da resistividade em função da temperatura para ligas do tipo $(Nb_{1-x}Mo_x)_{0,99}Fe_{0,01}$. p. 2
- 1.2 Momentos magnéticos de ligas diluídas. p. 3
- 1.3 Micrografia eletrônica de um SET. O 2DEG é representado pelas regiões pretas nesta figura. Há quatro eletrodos que permitem a manipulação do potencial de confinamento e o tunelamento entre o ponto quântico e os canais balísticos. Os eletrodos aparecem em côr cinza. p. 6
- 1.4 Condutância normalizada em um “single electron transistor”. Os parâmetros da figura são: Γ , que está associado com a probabilidade de tunelamento entre o ponto quântico e os canais balísticos e $\tilde{\epsilon}_0 = \epsilon_0/\Gamma$, onde ϵ_0 é a energia do nível localizado no ponto quântico. Estas medidas de Goldhaber-Gordon (19) mostram uma boa concordância com os resultados do NRG e a universalidade da condutância no regime Kondo. . . . p. 7
- 1.5 Diagrama pictórico de um SET apresentando o bloqueamento de Coulomb. O QD (a região entre as barreiras de tunelamento) possui níveis discretos de energia. Os canais balísticos da esquerda e da direita são reservatórios de elétrons. p. 8
- 2.1 Diagramas de Feynman de segunda ordem para a expansão perturbativa da matriz \mathcal{T} . Estes diagramas mostram a inversão de spin responsável pelo efeito Kondo. p. 15
- 2.2 Diagrama de um SET. Os canais balísticos estão no lado esquerdo e direito da figura. As barreiras de tunelamento representam o potencial de hibridização V no Hamiltoniano do SIAM. O potencial de porta V_g aplicado no QD permite aos níveis discretos de energia se mover para acima ou para baixo. A voltagem dreno-fonte V_{d-s} , leva o sistema para fora do equilíbrio e é útil para medidas de transporte. p. 17

2.3	Diagramas das funções de Green na aproximação da cadeia. Os círculos cheios correspondem aos cumulantes dos elétrons f , e os círculos vazios correspondem aqueles dos elétrons c . As linhas que unem dois vértices representam a hibridização, aqui tratada como perturbação. (a) Diagrama para a GF dos elétrons f na CHA. O diagrama nessa aproximação para estes elétrons, $G_{j_i\alpha_i,j_f\alpha_f}^{ff}(i\omega_n)$, é representado pelo quadrado cheio à esquerda. (b) A expansão perturbativa para a função $G_{\mathbf{k}'\sigma';\mathbf{k}\sigma}^{cc}(z_n)$ dos elétrons c na CHA é representada pelo quadrado vazio à esquerda. c) Diagrama para a GF dos elétrons $f - c$ na CHA. A função $G_{\mathbf{j};\mathbf{k},\sigma}^{fc}(z_n)$ é representada pelo quadrado semi-cheio no lado esquerdo.	p. 26
2.4	Na figura (a) é graficado o deslocamento de fase em função de ω segundo a Eq. 2.46. Na figura (b) a ressonância gerada pelo deslocamento de fase em (a) apresenta-se como uma lorentziana na densidade de estados.	p. 29
3.1	Diagrama de níveis do hamiltoniano atômico, junto com as transições envolvidas nas GF's atômicas (os pólos das GF's). Neste diagrama é possível perceber que os estados com número de carga n pertencem à mesma coluna, também pode ser visto que os estados $ 1\rangle$, $ 9\rangle$ e $ 10\rangle$ são singletos, os estados $ 6\rangle$, $ 7\rangle$ e $ 8\rangle$ formam um tripleto, e os outros 6 formam 3 dubletos.	p. 44
4.1	Densidade de estados para cada grau de liberdade de spin em função da frequência quando um campo magnético, $B = 0.9T_K$ é aplicado.	p. 46
4.2	Densidade total de estados ($\rho_{\uparrow} + \rho_{\downarrow}$) para diferentes valores do campo magnético B , perto do potencial químico. O campo magnético foi expresso em unidades da temperatura de Kondo, obtida quando $B = 0$, e nesse caso $T_K = 0,00043$	p. 47
4.3	Banda ressonante em E_f , para cada grau de liberdade de spin. É possível verificar que quando o campo magnético é aplicado a densidade com spin para baixo se alarga, ao passo que a densidade com spin para cima se estreita.	p. 48

4.4	Deslocamento de fase em função de B/T_K , onde B é o campo magnético aplicado e T_K a temperatura de Kondo. Os pontos e os triângulos representam o deslocamento de fase do sistema com spin para cima e para baixo, segundo o método atômico. Os dados representados pelas linhas pontilhadas foram obtidos a partir do ansatz de Bethe. O valor da energia da impureza E_f , neste caso é igual a $-0,07$	p. 49
4.5	Deslocamento de fase em função de B/T_K , onde B é o campo magnético aplicado e T_K a temperatura de Kondo. Os pontos e os triângulos representam o deslocamento de fase do sistema com spin para cima e para baixo, segundo o método atômico. Os dados representados pelas linhas pontilhadas foram obtidos a partir do ansatz de Bethe. O valor da energia da impureza E_f , neste caso é igual a $-0,10$	p. 50
4.6	Deslocamento de fase em função de B/T_K , onde B é o campo magnético aplicado e T_K a temperatura de Kondo. Os pontos e os triângulos representam o deslocamento de fase do sistema com spin para cima e para baixo, segundo o método atômico. Os dados representados pelas linhas pontilhadas foram obtidos a partir do ansatz de Bethe. O valor da energia da impureza E_f , neste caso é igual a $-0,15$	p. 51
4.7	Magnetização em função de B/T_K segundo o método atômico e o ansatz de Bethe (BA).	p. 52
4.8	Densidades espectrais em função de ω para diferentes valores dos parâmetros externos E_f e B (Nível da impureza e campo magnético aplicado).	p. 53
4.9	Densidade espectral para $E_f = -0,10$ com diferentes valores do campo magnético aplicado.	p. 54
4.10	Densidade de estados para $E_f = -0,07$ com diferentes valores do campo magnético aplicado.	p. 55
4.11	Densidade total em função de ω para $E_f = -0,1$ e $-0,07$. O campo magnético aplicado é $B = 1,1T_K$ e $0,5T_K$	p. 56
4.12	Visão pictórica de um ponto quântico imerso num canal balístico. Este sistema é realizado experimentalmente num transistor de um único elétron.	p. 56

4.13	Condutância de um QD imerso num canal balístico no limite de correlação infinita, $U \rightarrow \infty$ e $T = 10^{-5}$	p.57
4.14	Condutância de um QD imerso num canal balístico no limite de correlação infinita, $U \rightarrow \infty$, $T = 10^{-5}$ e $B = 10^{-4}$	p.58
4.15	Condutância de um QD imerso num canal balístico no limite de correlação infinita, $U \rightarrow \infty$, onde os parâmetros do sistema são os seguintes $T = 10^{-5}$ e $B = 2.62 * 10^{-4}$	p.59
4.16	Condutância de um QD imerso num canal balístico no limite de correlação infinita, $U \rightarrow \infty$, onde os parâmetros do sistema são os seguintes $T = 10^{-5}$ e $B = 4.8 * 10^{-4}$	p.60
4.17	Números de ocupação para cada grau de liberdade de spin com diferentes valores do campo magnético B . A temperatura de Kondo neste caso foi obtida a partir da metade da largura do pico de Kondo para $E_f = -0.1$. O valor do T_K obtido foi: $2.2144 * 10^{-4}$	p.61
4.18	Condutância dos canais “up” e “down” de um QD acoplado lateralmente a um canal balístico. Estes resultados foram obtidos numericamente por Torio et. al. (43), onde U é o valor da repulsão Coulombiana e Δ é o desdoblamento Zeeman.	p.62
4.19	Densidade de estados para os spins “para cima” para a rede de Anderson em presença do campo magnético aplicado.	p.64
4.20	Densidades total de estados para a rede de Anderson em presença do campo magnético aplicado.	p.65

1 Introdução

1.1 Impurezas magnéticas num metal

Num metal normal como ouro (*Au*), ou cobre (*Cu*), as principais contribuições para a resistividade elétrica se originam do espalhamento com impurezas no metal ou do espalhamento elétron-fônon. É bem conhecido que o espalhamento elétron-fônon gera um termo na resistividade dependente da quinta potência da temperatura (T), $\rho \propto T^5$, e o espalhamento com as impurezas contribuem com um termo independente de T . Se somente existissem num metal os processos indicados acima, a resistividade a baixas temperaturas teria que decrescer monotonicamente e saturar num valor finito.

Entretanto, resultados experimentais obtidos por vários grupos na década de 60, mostraram que esse comportamento não era obtido. Entre esses resultados podemos citar o de Sarachik et.al. (1), em medidas da resistividade em ligas de Molibdênio-Nióbio (*Mo-Nb*) e Molibdênio-Rênio (*Mo-Re*), com uma concentração de impurezas de 1% de ferro (*Fe*), (veja a Fig. 1.1). Ao invés disso, foi encontrado que em alguns casos a medida que a temperatura diminuía, a resistividade decrescia até atingir um mínimo na temperatura T_K (que ficou conhecida como temperatura de Kondo), e logo voltava a crescer até chegar a uma saturação em um valor finito para temperaturas muito próximas de zero. Em outros casos, o mínimo na resistividade não se desenvolvia, porém ela saturava num valor finito para temperaturas também muito próximas de zero.

No estudo das impurezas magnéticas em matrizes metálicas, escolhe-se usualmente um metal não magnético como ouro (*Au*), prata (*Ag*), Cobre (*Cu*), etc que possui camadas s fechadas e são metais paramagnéticos. Como impurezas se escolhe normalmente metais de transição como o Vanádio (*V*), Manganês (*Mn*), Ferro (*Fe*) ou Cobalto (*Co*), etc. Esses átomos, no seu estado isolado, preservam o seu momento magnético. A questão central aqui é a seguinte: esses átomos manterão o seu momento magnético quando diluídos na

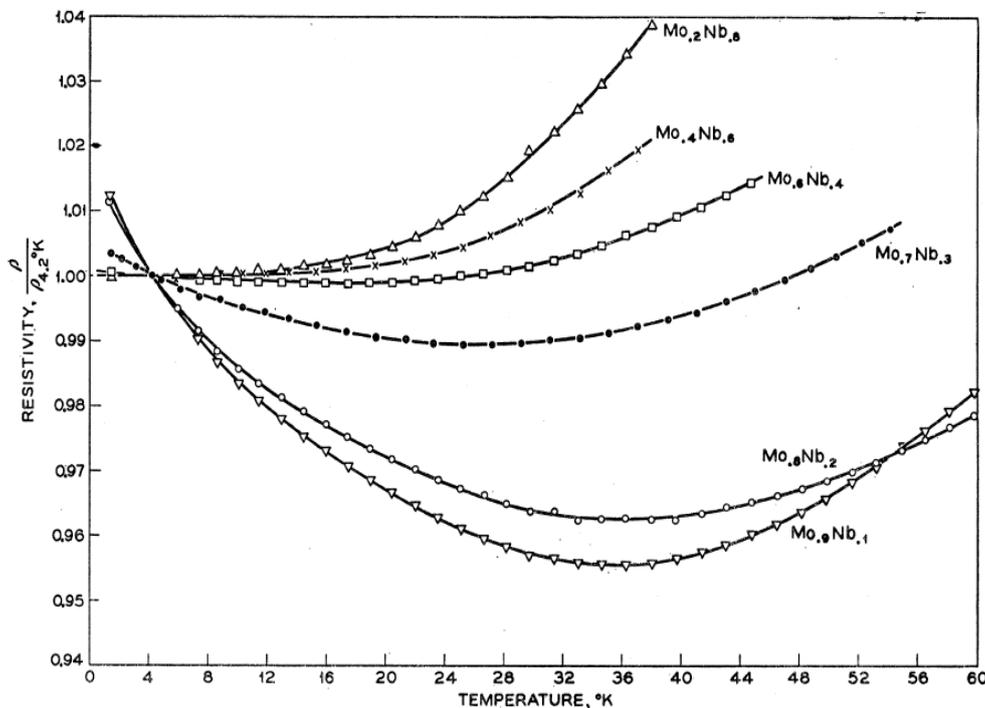


Figura 1.1: Baseado no artigo de Sarachik (1) se apresentam medidas da resistividade em função da temperatura para ligas do tipo $(Nb_{1-x}Mo_x)_{0,99}Fe_{0,01}$.

matriz metálica? - A resposta a essa pergunta foi dada por Anderson em seu trabalho de 1961 (2), onde ele introduziu um Hamiltoniano que descreve uma impureza magnética dissolvida em uma matriz metálica e sujeita a uma correlação eletrônica U ; esse modelo ficou conhecido como o modelo de Anderson para a impureza. Neste trabalho, Anderson mostrou que haverá formação de momento magnético na impureza sempre que a correlação eletrônica U for suficientemente grande e o nível E_f da impureza estiver suficientemente dentro da superfície de Fermi, ou seja, supondo que o potencial químico μ esteja localizado em $\mu = 0$. Então, quanto mais negativo for o E_f e quanto maior for a correlação U , mais fácil será a formação do momento magnético.

Na definição de Heeger (3), um momento magnético localizado só existirá experimentalmente se a contribuição da impureza à susceptibilidade for fortemente dependente da temperatura na forma da lei de Curie-Weiss (1.1), onde μ_{eff} é o momento magnético efetivo da impureza, k_B é a constante de Boltzman, T é a temperatura e θ é a temperatura de Curie. Se a susceptibilidade não depender da temperatura, não haverá formação de

momento localizado.

$$\chi = \frac{\mu_{eff}^2}{3k_B(T - \theta)}. \quad (1.1)$$

No trabalho de Clogston et.al.(4) foi medido a susceptibilidade magnética χ de ligas de nióbio e molibdênio com uma porcentagem bem baixa de ferro. Com esses dados foi obtido o valor do momento magnético das amostras fazendo um ajuste da susceptibilidade à lei de Curie-Weiss. Como pode ser visto na Fig. 1.2, a formação de momento magnético depende do tipo de átomo de impureza, por exemplo há formação desses momentos desde o *Nb* até *Mo*, desaparecendo em rênio (*Re*), e voltando a aparecer em rutênio (*Ru*) e ródio (*Rh*).

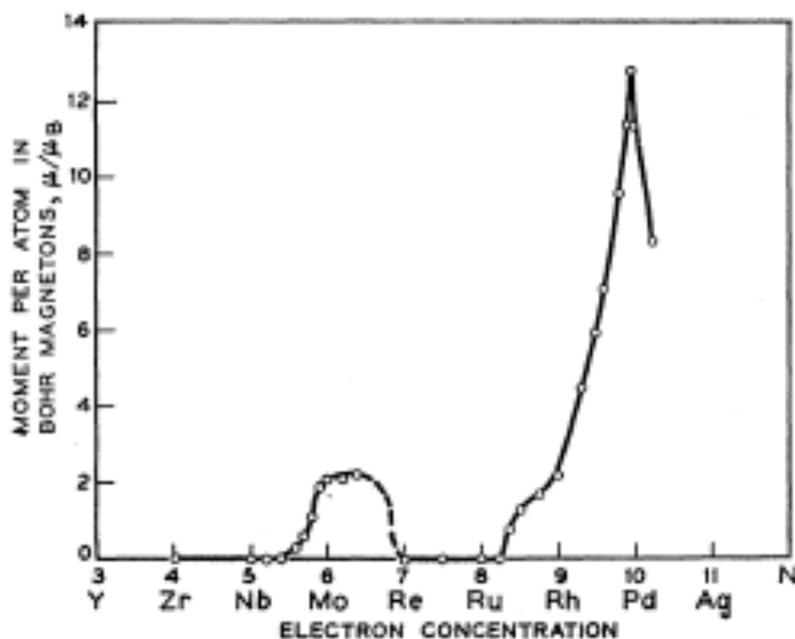


Figura 1.2: Momentos magnéticos, em magnetons de Bohr, de um átomo de ferro dissolvido em metais de transição e ligas diluídas em função da concentração de elétrons.

O primeiro a perceber que existia uma relação direta entre a formação de momentos magnéticos em matrizes metálicas e a existência do mínimo na resistividade elétrica ρ foi J. Kondo, ou seja, quando o mínimo na resistividade aparecia, o sistema mostrava a formação de momento magnético, e quando o momento magnético se formava, também aparecia um mínimo em ρ . Esta importante conexão levou J. Kondo (5) no ano de 1964 a propôr um modelo que incluía uma interação antiferromagnética entre o spin da

impureza magnética e os elétrons do metal hospedeiro. Com um hamiltoniano de troca tipo $s - f$ (elétron de condução s - elétron localizado f), Kondo tratou perturbativamente o problema até segunda ordem em teoria de perturbação, e ao final dos cálculos encontrou uma contribuição logarítmica na resistividade, ($\rho_K \propto \ln(k_B T / D)$), onde D é uma medida da largura da banda de condução. Embora este novo termo tenha explicado o mínimo na resistividade, ele fracassou em explicar a sua saturação num valor finito. Isso ocorre porque o tratamento perturbativo não é capaz de descrever a física desses sistemas abaixo da temperatura de Kondo T_K , que é como ficou conhecida a temperatura onde ocorria o mínimo da resistividade. Esta diferença entre o modelo teórico e as medidas experimentais mostraram que a teoria de perturbação não conseguia uma boa descrição desse tipo de sistemas. Anos mais tarde, esses sistemas foram classificados como fazendo parte da família dos sistemas fortemente correlacionados.

Aproximadamente uma década depois da explicação de Kondo do mínimo da resistividade, Kenneth Wilson (6, 7) desenvolveu uma técnica não perturbativa para abordar este tipo de sistemas correlacionados. Sua aproximação, chamada em inglês “the numerical renormalization group” (NRG), estava baseada nas idéias de escala de Anderson (8). O NRG foi o método que do ponto de vista teórico, resolveu o problema das impurezas magnéticas diluídas em metais (problema de Kondo), pelo menos no que diz respeito ao cálculo das propriedades de baixas temperaturas, no regime de Kondo. O método é muito poderoso, porém tem um custo computacional alto e sua aplicação até os dias de hoje, tem se restringido ao problema da impureza, uma vez que a rede de Anderson ainda é um problema em aberto, pois o NRG não consegue apresentar uma solução satisfatória para esse último caso.

Para o problema da impureza, o NRG consegue soluções em todos os regimes do sistema a baixas temperaturas, desde o regime de baixa ocupação da impureza, passando pelo regime de flutuação de carga até o regime de Kondo. Além das propriedades estáticas como a susceptibilidade, o calor específico e a entropia, generalizações posteriores do NRG conseguiram calcular também propriedades dinâmicas e de transporte (9). O NRG é um método não perturbativo que aproveita o mapeamento do hamiltoniano de Anderson de uma impureza num hamiltoniano de uma cadeia semi-infinita, para achar os autoestados e os autovalores do hamiltoniano iterativamente.

O grande problema dos métodos de diagonalização exata é ter que tratar com o

acréscimo exponencial da dimensão do espaço de Hilbert; em geral essa dimensão é da forma a^N , onde N é a quantidade de partículas ou sítios na rede. No entanto, no NRG para a impureza, o problema da dimensão do espaço é contornado truncando os autoestados de maiores energias, isto porque foi percebido que o efeito Kondo é um fenômeno de baixas energias que envolve os autoestados muito próximos à energia de Fermi.

1.2 Pontos quânticos e os “single electron transistor’s” SET’s

O renascimento do efeito Kondo ocorreu a partir da observação de resultados similares, em medidas de transporte, entre os sistemas metálicos com impurezas magnéticas diluídas e os “single electron transistor’s” (SET’s); construídos experimentalmente, pela primeira vez, por D. Goldhaber-Gordon et.al. (19). Um SET contém uma quantidade muito pequena de elétrons localizados (átomo artificial ou ponto quântico) numa região nanoscópica (análogo a uma impureza magnética) fortemente acoplada a canais balísticos (análogo ao metal hospedeiro).

O SET é formado por meio de um “two-dimensional electron gas” (2DEG), onde a corrente elétrica é direcionada por meio de portas metálicas geradas por litografia, como vistas na Fig. 1.3. O 2DEG se localiza na interface entre as heteroestruturas semicondutoras (e.g. GaAs/AlGaAs). Na Fig. 1.3 um potencial eletrostático aplicado nos eletrodos superior e inferior no lado esquerdo, e o eletrodo no lado direito, controla o acoplamento ponto quântico - canal de condução. Este último acoplamento é escrito no “single impurity Anderson model” (SIAM) como um potencial de hibridização entre os elétrons localizados e os elétrons de condução. A energia do estado localizado, é controlada no SET por meio de uma voltagem de porta. Esta é aplicada entre o eletrodo do meio no lado esquerdo e o eletrodo no lado direito.

O advento do NRG de Wilson, permitiu a obtenção de uma série de resultados exatos para o problema de Kondo. Para temperaturas maiores que a temperatura de Kondo T_K , o spin da impureza se comporta como no caso livre, ou seja a susceptibilidade segue a lei de Curie-Weiss. No entanto, diminuindo-se a temperatura, abaixo da temperatura de Kondo, a susceptibilidade da impureza mostra uma blindagem do momento magnético devido a formação do estado fundamental de Kondo (singlete). Esse é um estado emaranhado formado pelos elétrons livres do metal hospedeiro (canal balístico) e a impureza magnética (ponto quântico).

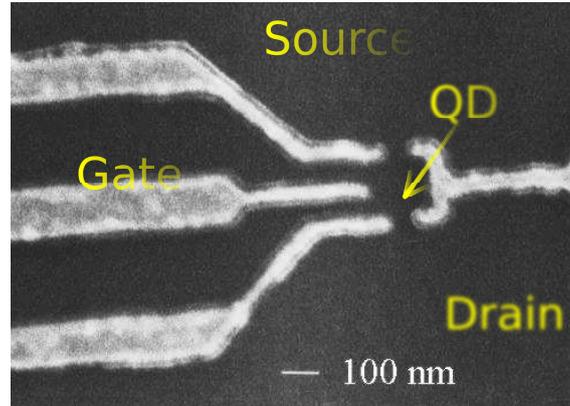


Figura 1.3: Micrografia eletrônica de um SET. O 2DEG é representado pelas regiões pretas nesta figura. Há quatro eletrodos que permitem a manipulação do potencial de confinamento e o tunelamento entre o ponto quântico e os canais balísticos. Os eletrodos aparecem em côr cinza.

No limite $T \rightarrow 0$, pelo fato do produto da susceptibilidade da impureza pela temperatura tender a zero $T\chi_{imp} \rightarrow 0$, o momento magnético da impureza é completamente compensado e o estado fundamental do sistema é um singlete. Este resultado mostra a alta correlação que existe neste sistema. Outro resultado importante das idéias pioneiras de Wilson foi o bom ajuste da resistividade e da susceptibilidade vs. temperatura com fórmulas empíricas obtidas experimentalmente. A temperaturas abaixo de T_K a resistividade e a susceptibilidade são proporcionais a: $1 - d(T/T_K)^2$ e $1 - g(T/T_K)^2$, respectivamente. Para $T > T_K$ as mesmas quantidades são proporcionais a: $a + b \ln(T)$ e $1/(T + \theta)$ (17). É importante observar que estas quantidades mostram um comportamento universal.

Na Fig. 1.4 representamos a condutância normalizada G/G_0 em função de T/T_K , para diferentes valores de $\tilde{\epsilon}_0$, onde este parametro é responsável pelo ajuste do sistema no regime Kondo $\tilde{\epsilon}_0 < -0.5$, ou no regime de valência intermediária $-0.5 < \tilde{\epsilon}_0 < 0$ (19). Na Fig. 1.4 pode ser observado que o resultado do NRG para a condutância se ajusta bem com as medidas de Goldhaber-Gordon. Para temperaturas $T < T_K$ a condutância normalizada G exibe um comportamento parabólico e a $T > T_K$ um comportamento logarítmico. A concordância quantitativa entre a condutância num SET e os resultados obtidos pelo NRG no SIAM, se constituiu na primeira evidência experimental de que o sistema, “quantum dot”(QD) acoplado a um canal balístico, se comportava como um verdadeiro sistema de Kondo.

Logo depois, vieram outros trabalhos que ratificaram esta conclusão observando a

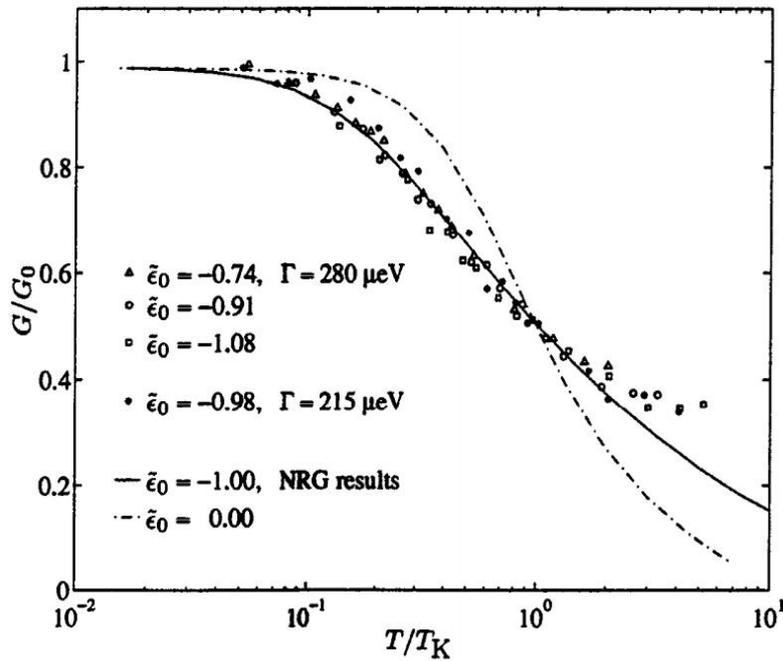


Figura 1.4: Condutância normalizada em um “single electron transistor”. Os parâmetros da figura são: Γ , que está associado com a probabilidade de tunelamento entre o ponto quântico e os canais balísticos e $\tilde{\epsilon}_0 = \epsilon_0/\Gamma$, onde ϵ_0 é a energia do nível localizado no ponto quântico. Estas medidas de Goldhaber-Gordon (19) mostram uma boa concordância com os resultados do NRG e a universalidade da condutância no regime Kondo.

quantidade de elétrons no átomo artificial. Quando o QD tem um número ímpar de elétrons, e portanto possui spin diferente de zero, a condutância diferencial, medida quando a diferença de potenciais químicos entre o lado direito μ_r e o esquerdo μ_l do SET se anula ($\mu = \mu_r - \mu_l = 0$), é grande para todos os valores da voltagem de porta a temperatura zero. Este aumento na condutância se origina da formação de um novo estado em $\mu = 0$ a baixas temperaturas, onde os elétrons no átomo artificial estão acoplados com aqueles do canal balístico num estado sigleto, o estado de Kondo.

Embora um SET seja a realização física do modelo de Anderson de uma impureza, e ele apresente as características do efeito Kondo, existe mais um fenômeno que é importante mencionar porque ele surge devido a natureza nanoscópica do sistema; que é o bloqueamento de Coulomb. Esse efeito é gerado como uma consequência da quantização de carga e energia no QD. Veja por exemplo a Fig. 1.5, e suponha a situação de equilíbrio (os potenciais químicos μ_l e μ_r são iguais), também suponha que os estados discretos

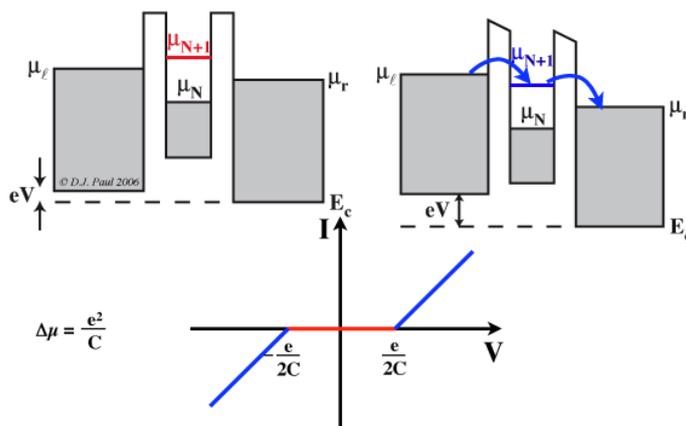


Figura 1.5: Diagrama pictórico de um SET apresentando o bloqueamento de Coulomb. O QD (a região entre as barreiras de tunelamento) possui níveis discretos de energia. Os canais balísticos da esquerda e da direita são reservatórios de elétrons.

no QD abaixo (acima) de μ_l estão todos cheios (vazios). A probabilidade de um elétron no canal esquerdo, passar até o canal direito é quase zero porque ele não pode tunelar no QD, devido ao fato de que os níveis do QD não lhe são acessíveis. Classicamente, pode-se interpretar esta situação como se o QD estivesse acoplado aos canais da esquerda e da direita por meio de uma energia capacitiva $E_C = e^2/2C$, onde e é a carga do elétron e C é a capacitância do SET. Caso os elétrons quisessem atravessar o QD teriam que gastar uma energia extremamente grande para vencer a repulsão Coulombiana; esse é o bloqueamento de Coulomb.

Agora, suponha que uma tensão dreno-fonte é aplicada de tal maneira que o potencial químico μ_l e μ_r estejam perto do nível μ_{N+1} no QD, veja a Fig. 1.5. Nesse caso, a probabilidade de transmissão de um elétron entre os canais é alta porque agora existem estados acessíveis aos elétrons e por tanto uma corrente poderá ser estabelecida; veja o gráfico da corrente tensão (I-V), onde para $|V| < -e/2C$ o comportamento é linear e para $-e/2C < V < e/2C$ a corrente é zero e para $|V| > e/2C$ o comportamento é linear novamente. Quando o QD tem uma quantidade grande de estados discretos e a tensão dreno-fonte aumenta, no gráfico corrente-tensão ($I - V$) se observa um padrão de escadas. Sendo esta última uma assinatura do bloqueamento de Coulomb. Finalmente, é importante dizer que num SET o bloqueamento de Coulomb é atingido a temperaturas muito menores que a energia característica E_C . Para temperaturas maiores que E_C , as flutuações térmicas podem levar ao estabelecimento de correntes elétricas.

Tipo de sistema	Exemplo
Kondo diluído	$(Nb_{1-x}Mo_x)_{0,99}Fe_{0,01}$, $(Ru_{1-x}Rh_x)_{0,99}Fe_{0,01}$
Kondo concentrado	$La_{1-x}Ce_x$, $La_{1-x}Ce_xCu_6$
Fermions pesados	$CeCu_6$, $CeAl_3$, UCu_5 , $CeRu_2Si_2$, UPt_3
Fermions pesados supercondutores	UPt_3 , UBe_{13} , $CeCu_2Si_2$
Isolantes de Kondo	SmB_6 , YbB_{12} , $Ce_3Bi_4Pt_3$, $FeSi$
Líquidos não fermionicos	$YbCu_{5-x}Al_x$, U_2Pt_2In , UCu_4Pd , $UCu_{3,5}Pd_{1,5}$
Pontos críticos quânticos	$ZrZn_2$, $Ce_{1-x}LaRu_2Si_2$, $CeCu_{1-x}Au_6$

Tabela 1.1: Exemplos de sistemas eletrônicos fortemente correlacionados

1.3 A rede de Anderson

Nas ligas de *Mo* e *Nb* que foram estudadas por Sarachik et.al. (1), na análise do mínimo da resistividade, (veja, por exemplo, a primeira linha na tabela 1.1), a concentração de impurezas de *Fe* é tão baixa que as interações entre impurezas são desprezíveis. As medidas feitas nestes sistemas foram obtidas de médias sobre as impurezas. A medida que a concentração aumenta, a interação entre os momentos localizados começa a se tornar importante e, simultaneamente, o caráter de sistema desordenado se manifesta de forma mais intensa e surgem novos fenômenos devido a competição entre o efeito Kondo e a desordem introduzida pelas interações entre as impurezas. Nesta região, as impurezas interagem fortemente via uma interação de Ruderman- Kittel-Kasuya-Yosida (*RKKY*) que é uma interação entre os momentos magnéticos é mediada pelos elétrons de condução e tende a zero de forma oscilatória e proporcional a r^{-3} . Neste regime, altamente desordenado, ocorre uma transição de fase conhecida como regime de “Vidro de Spin”. Na região de altas concentrações, as impurezas estão mais próximas e interagem via interação de troca direta passando o sistema a adquirir algum tipo de ordem magnética (ferromagnética ou antiferromagnética). Outra classe de sistemas desordenados que tem sido muito estudados na última década, são aqueles que exibem pontos críticos quânticos devido a presença da desordem. Nesse caso estão os dois últimos sistemas da última linha da tabela 1.1.

Do ponto de vista teórico, os sistemas indicados na tabela 1.1, em princípio, podem ser descritos pelo “periodic Anderson model” (PAM), também conhecido como a rede de Anderson. No PAM é considerado uma rede de elétrons localizados que interagem com elétrons não localizados através de um potencial de hibridização. Nesses sistemas, existe uma competição entre o efeito Kondo e a interação *RKKY*. Esta última interação entre os

momentos magnéticos é gerada pelo acoplamento entre os elétrons localizados f mediado pelos elétrons de condução c e varia de acordo com, $J_{RKKY}(r) \propto -J^2 \rho \cos(2k_F r)/k_F r$, onde k_F é o vector de onda de Fermi, r a distância entre os momentos, ρ a densidade dos elétrons de condução, e J a energia de troca. Acredita-se que a competição entre o efeito Kondo e a interação RKKY é a responsável pela existência de um ponto crítico quântico que tem uma forte influência no regime antiferromagnético e de líquido de Fermi destes sistemas.

Na terceira linha da tabela 1.1 são listados alguns materiais conhecidos como férmions pesados. Foram descoberto por Andres, Graebner e Ott em 1975 (10), que mediram um enorme coeficiente γ do calor específico no $CeAl_3$, sendo esse o primeiro férmion pesado a ser descoberto. Os férmions pesados são compostos intermetálicos que possuem os elementos químicos com as camadas f instáveis, como por exemplo, ytérbio (Yb), cério (Ce) e urânio (U). Estes sistemas seguem o comportamento dos líquidos de Fermi, onde as características mais importantes são: calor específico com uma dependência linear na temperatura, uma susceptibilidade do tipo Pauli, e resistividade dependente do quadrado da temperatura. No entanto, a diferença entre os líquidos de Fermi convencionais e os férmions pesados está no alto valor da massa efetiva obtida a partir de medidas do calor específico e da susceptibilidade magnética. Esta chega a ser no ($CeCu_6$) cem vezes maior que a massa dos elétrons num metal normal tipo Cu (11). Este acréscimo na massa efetiva vem da forte renormalização dos coeficientes no calor específico e na resistividade devido a forte correlação eletrônica existente nestes materiais.

Outro exemplo de sistemas fortemente correlacionados listados na tabela 1.1 são os férmions pesados supercondutores. As características supercondutoras destes materiais são sua grande profundidade de penetração de London, que é 20 ou 30 vezes maior que nos supercondutores convencionais, e o pequeno comprimento de coerência (12). Esta última quantidade é inversamente proporcional à massa efetiva. As características mencionadas acima permitem supôr que são os elétrons f que estão atuando na formação da supercondutividade (13). Porém, ainda não existe uma teoria microscópica que explique o mecanismo de emparelhamento eletrônico, mas existe um forte indício de que o responsável pelo emparelhamento sejam as flutuações de spin presentes no sistema. Esta proposta está baseada nas medidas do espalhamento por nêutrons que foram feitas no material (UPt_3) (12), e que mostraram as flutuações de spin mencionadas acima.

Os isolantes de Kondo, como por exemplo $FeSi$ ou $Ce_3Bi_4Pt_3$ (veja a tabela 1.1) são também outro exemplo muito interessantes na física dos sistemas fortemente correlacionados, porque eles exibem a habilidade de uma rede ordenada de momentos localizados, de transformar o sistema, que é metálico à temperatura ambiente em um isolante a baixas temperaturas. Segundo medidas de espalhamento inelástico de neutrons, a uma temperatura de $2K$, o composto $Ce_3Bi_4Pt_3$ apresenta um gap de 12 meV (14),(15) que está associado ao gap que se abre no pico de Kondo da rede de Anderson a muito baixas temperaturas (16). Outro resultado a ser levado em conta é que a partir do valor da constante de rede no composto $Ce_3Bi_4Pt_3$ se obteve que a valência do Ce está entre $3+$ e $4+$. Esta última característica é bem conhecida entre os isolantes de Kondo, pois seus elétrons f mostram um comportamento tipo valência intermediária (17).

Os líquidos não fermiônicos, indicados na Tabela 1.1, se comportam de uma maneira bem diferente daquela dos líquidos de Fermi. Por exemplo, os resultados para os compostos $UCu_{3.5}Pd_{1.5}$ e UCu_4Pd são os seguintes: a resistividade é igual a, $\rho = \rho_0 - AT$, para os valores de temperatura no intervalo $[0.3 - 10]K$, mas com o coeficiente angular maior em UCu_4Pd que no $UCu_{3.5}Pd_{1.5}$ (18). A susceptibilidade magnética é, $\chi = \chi_0 T^{-1+\lambda}$, onde $\lambda \approx 0.7$ no intervalo $[1.8 - 10]K$, para os dois compostos. O calor específico dividido pela temperatura segue o seguinte comportamento, $c/T \propto -\ln T(T^{-1+\lambda})$ para $UCu_{3.5}Pd_{1.5}$ (UCu_4Pd) no intervalo $[0.3 - 10]K$ ($[1 - 10]K$).

Também podemos encontrar líquidos não fermiônicos em sistemas ordenados, como é o caso do composto U_2Pt_2In que tem um comportamento logarítmico no calor específico dividido pela temperatura ($c/T \propto -\ln T$) no intervalo de temperaturas $[1.2 - 5.5]K$. A explicação para os fenômenos apresentados por estes sistemas ainda não está completamente desenvolvida, porém se acredita que a existência de um ponto crítico quântico pode gerar este comportamento particular. As transições de fase clássicas são geradas por flutuações térmicas, enquanto, uma transição de fase quântica é gerada por flutuações quânticas à $T = 0$. Estas últimas podem ser produzidas por um campo magnético externo, dopagem ou pressão. Embora a transição de fase quântica efetuada desde um estado fundamental ordenado até um desordenado, passando por um ponto crítico quântico, ocorra a $T = 0$, as regiões bem próximas do ponto crítico sofrem o efeito da presença do ponto crítico.

2 Teoria e modelos

Embora o foco dessa dissertação seja apresentar alguns resultados específicos associados com a influência do campo magnético tanto sobre a impureza quanto sobre a rede de Anderson, discutiremos neste capítulo, alguns métodos teóricos que serão usados ao longo do trabalho. O método da equação de movimento será discutido dada a sua simplicidade em obter ressonâncias e auto-energias, embora do ponto de vista físico seja um método incontrolável e que apresenta certas inconsistências termodinâmicas (21). A expansão em cumulantes das funções de Green também serão discutidas em certo detalhe, pois o desenvolvimento do método atômico é baseado nessas expansões. Finalmente alguns resultados e idéias sobre o Ansatz de Bethe serão apresentados pois iremos usar esse método para comparar com os resultados obtidos com esse trabalho.

2.1 Explicação de Kondo do mínimo da resistividade

Para explicar o mínimo na resistividade seguiremos como referência, o segundo capítulo do livro de Hewson (22) e o artigo de Kondo (5). A dependência logarítmica da resistividade em função da temperatura é obtida quando é levado em conta o segundo termo na expansão perturbativa da matriz de transferência \mathcal{T} . Se a expressão da matriz \mathcal{T} é conhecida até qualquer ordem, é possível achar a condutividade do sistema dentro da aproximação de Boltzman de transporte

$$\sigma(T) = -\frac{2e^2}{3} \int v_k^2 \tau_1(k) \frac{\partial f}{\partial \epsilon_k} \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3}, \quad (2.1)$$

onde $f(\dots)$ é a distribuição de Fermi, v_k é o módulo da velocidade e $\tau_1(k)$ é o tempo de relaxação dado por

$$\frac{1}{\tau_1(k)} = 2\pi c_{imp} \int \delta(\epsilon_k - \epsilon_{k'}) |\mathcal{T}_{kk'}|^2 (1 - \cos \theta') \frac{d\mathbf{k}'}{(2\pi)^3}, \quad (2.2)$$

onde c_{imp} é a concentração de impurezas no sistema e a série perturbativa da matriz \mathcal{T} é igual a

$$\mathcal{T}(\varepsilon^+) = V + VG_0^+V + VG_0^+VG_0^+V + \dots = V(I - G_0^+V)^{-1}, \quad (2.3)$$

onde G_0 é o propagador livre e V o potencial de interação, $H = H_0 + V$. O Hamiltoniano usado por Kondo na sua derivação do mínimo da resistividade, era composto por uma contribuição cinética que vem dos elétrons de condução e uma interação de troca tipo $s - d$ entre os elétrons de condução e a impureza magnética,

$$H_{s-d} = \sum_{k,k'} J_{k,k'} \left(S^+ c_{k,\downarrow}^\dagger c_{k',\uparrow} + S^- c_{k,\uparrow}^\dagger c_{k',\downarrow} + S_z (c_{k,\uparrow}^\dagger c_{k',\uparrow} - c_{k,\downarrow}^\dagger c_{k',\downarrow}) \right), \quad (2.4)$$

onde S_z e S^\pm são os operadores de spin para um estado com momento angular S . Os elementos matriciais $\langle k', \uparrow | \mathcal{T}(\varepsilon^+) | k, \uparrow \rangle$ em primeira ordem de perturbação, não são muito importantes porque sua contribuição à resistividade é independente da temperatura. A contribuição notável vem do termo da segunda ordem,

$$\langle k', \uparrow | \mathcal{T}(\varepsilon^+) | k, \uparrow \rangle = \langle k', \uparrow | H_{s-d} G_0^+ H_{s-d} | k, \uparrow \rangle. \quad (2.5)$$

Quando a interação $s - d$ é substituída no triplo produto matricial, são obtidos sete termos e entre eles só dois são responsáveis pela inversão do spin; o primeiro e o terceiro termo no lado direito da equação 2.6. Inicialmente vamos considerar somente a dinâmica da impureza e vamos fazer o seguinte produto, $S^+ S^- | \uparrow \rangle$. Da esquerda para a direita, quando o operador de spin é aplicado ao estado inicial $| \uparrow \rangle$, é obtido o ket, $| \downarrow \rangle$. Quando o segundo operador é aplicado, o estado volta a seu valor inicial. Isto quer dizer que não há uma variação líquida na componente de spin, em vez de uma mudança existe uma inversão de spin nos estados intermediários; veja o spin na linha abaixo na Fig. 2.1. Outro produto que fornece a inversão de spin é, $S^- S^+ | \downarrow \rangle$. Os restantes cinco termos mudam ou não o spin da impureza sem inversão de spin. Kondo mostrou que os processos relevantes para a contribuição dependente da temperatura à resistividade estavam relacionados com a inversão do spin (5), e devido a isso vamos calcular somente os elementos matriciais abaixo

$$\begin{aligned}
H_{S-d}G_0^+H_{S-d} &= \sum_{k_1,k'_1,k_2,k'_2} J_{k_1,k'_1}J_{k_2,k'_2} \left(S^+c_{k_1,\downarrow}^\dagger c_{k'_1,\uparrow} G_0 S^-c_{k_2,\uparrow}^\dagger c_{k'_2,\downarrow} \right. \\
&+ S^+c_{k_1,\downarrow}^\dagger c_{k'_1,\uparrow} G_0 S_z [c_{k_2,\uparrow}^\dagger c_{k'_2,\uparrow} - c_{k_2,\downarrow}^\dagger c_{k'_2,\downarrow}] \\
&+ S^-c_{k_1,\uparrow}^\dagger c_{k'_1,\downarrow} G_0 S^+c_{k_2,\downarrow}^\dagger c_{k'_2,\uparrow} \\
&\left. + S^-c_{k_1,\uparrow}^\dagger c_{k'_1,\downarrow} G_0 S_z [c_{k_2,\uparrow}^\dagger c_{k'_2,\uparrow} - c_{k_2,\downarrow}^\dagger c_{k'_2,\downarrow}] \dots \right) \quad (2.6)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&\sum_{k_1,k'_1,k_2,k'_2} \frac{J^2}{N_s^2} \langle k', \uparrow | S^-c_{k_1,\uparrow}^\dagger c_{k'_1,\downarrow} G_0 S^+c_{k_2,\downarrow}^\dagger c_{k'_2,\uparrow} | k, \uparrow \rangle \\
&\sum_{k_1,k'_1,k_2,k'_2} \frac{J^2}{N_s^2} \langle k', \uparrow | S^+c_{k_2,\downarrow}^\dagger c_{k'_2,\uparrow} G_0 S^-c_{k_1,\uparrow}^\dagger c_{k'_1,\downarrow} | k, \uparrow \rangle \quad (2.7)
\end{aligned}$$

Na equação 2.6 foi considerado uma interação localizada independente de k , $J_{k,k'} = J/N_s$, e para obter a contribuição dependente da temperatura à resistividade, é preciso achar o valor dos dois últimos elementos matriciais na Eq. 2.7. Calculando estes elementos as contribuições não nulas são dadas por aquelas com $k = k'_2$, $k' = k_1$, $k_2 = k'_1$, logo algumas somas são reduzidas e é obtido

$$\begin{aligned}
&\sum_{k_2} \frac{J^2 S^- S^+}{N_s^2} \langle vacuum | c_{k_2,\downarrow} (\varepsilon + is - H_0)^{-1} c_{k_2,\downarrow}^\dagger | vacuum \rangle \\
&\sum_{k_2} \frac{J^2 S^+ S^-}{N_s^2} \langle vacuum | c_{k_2,\downarrow}^\dagger (\varepsilon + is - H_0)^{-1} c_{k_2,\downarrow} | vacuum \rangle, \quad (2.8)
\end{aligned}$$

onde ainda é possível reduzir as últimas equações com ajuda das definições $\langle vacuum | c_{k_2,\downarrow} c_{k_2,\downarrow}^\dagger | vacuum \rangle = 1 - f(\varepsilon_{\mathbf{k}_2})$, e seu par $\langle vacuum | c_{k_2,\downarrow}^\dagger c_{k_2,\downarrow} | vacuum \rangle = f(\varepsilon_{\mathbf{k}_2})$, onde $f(\dots)$ é a distribuição de Fermi. Além disso, por causa da algebra satisfeita pelos operadores de momento angular, (S^+, S^-, S_z) $S^+ S^- = S^- S^+ + 2S_z$ e $S^- S^+ = S^2 - S_z^2 - S_z$, a soma da primeira e segunda equação em 2.8 é igual a

$$(S^2 - S_z^2 - S_z) \frac{J^2}{N_s^2} \sum_{k_2} \frac{1}{\varepsilon + is - \varepsilon(\mathbf{k}_2)} + 2S_z \frac{J^2}{N_s^2} \sum_{k_2} \frac{f(\varepsilon_{\mathbf{k}_2})}{\varepsilon + is - \varepsilon(\mathbf{k}_2)}. \quad (2.9)$$

Na Fig. 2.1 (a) expressamos diagramaticamente a primeira equação de (2.7). O

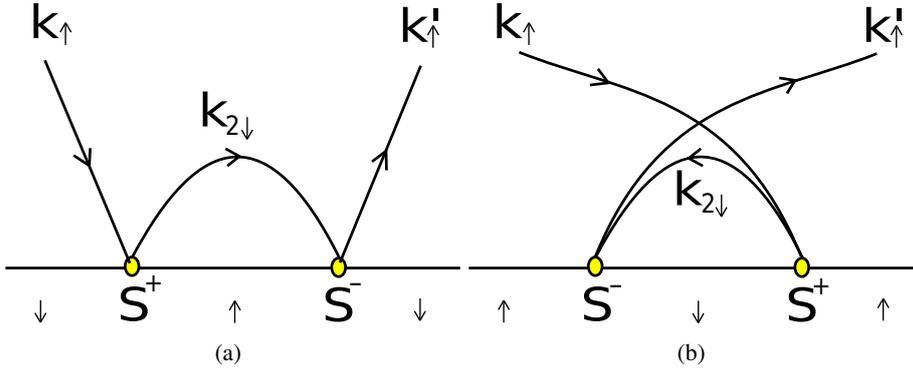


Figura 2.1: Diagramas de Feynman de segunda ordem para a expansão perturbativa da matriz \mathcal{T} . Estes diagramas mostram a inversão de spin responsável pelo efeito Kondo.

elétron de condução $\mathbf{k} \uparrow$ sofre um espalhamento pela impureza com inversão de spin e é levado ao estado intermediário de um buraco desocupado $\mathbf{k}_2 \downarrow$, a seguir o elétron $\mathbf{k}_2 \downarrow$ é espalhado para o estado final $\mathbf{k}' \uparrow$. O diagrama na Fig. 2.1 (b) expressa a segunda equação do mesmo conjunto; um elétron no estado ocupado $\mathbf{k}_2 \downarrow$ é espalhado pela impureza, sofre inversão de spin e é levado ao estado $\mathbf{k}' \uparrow$; a seguir o buraco restante $\mathbf{k}_2 \downarrow$ é aniquilado pelo estado inicial $\mathbf{k} \uparrow$ com outra inversão de spin, deixando o estado final $|\mathbf{k}' \uparrow\rangle$.

Agora veja o segundo termo na ultima equação 2.9, que é dependente da temperatura através da função de Fermi, ao passo que o primeiro não é porque a função de Fermi não aparece. Segundo as idéias de Kondo, o primeiro termo da Eq. 2.9 será desprezado, mas o segundo termo será somado com seu elemento matricial par $\langle k', \downarrow | \mathcal{T} | k, \downarrow \rangle$, $\langle k', \uparrow | \mathcal{T} | k, \downarrow \rangle$, e $\langle k', \downarrow | \mathcal{T} | k, \uparrow \rangle$. No final, o inverso do tempo de relaxação, dentro da aproximação de segunda ordem, é dado por

$$\frac{1}{\tau(k)} = \frac{3nc_{imp}J^2S(S+1)}{2e^2\hbar\varepsilon_F} (1 - 2J(g(\varepsilon_{\mathbf{k}}) + g^*(\varepsilon_{\mathbf{k}}))), \quad (2.10)$$

onde $g(\varepsilon)$ é igual a $\frac{1}{N_s} \sum_{\mathbf{k}} \frac{f(\varepsilon_{\mathbf{k}})}{\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon - i\delta}$, e o resultado final para a contribuição da impureza à resistividade é

$$R_{imp}^{spin} = \frac{3\pi m J^2 S(S+1)}{2e^2 \hbar \varepsilon_F} [1 - 4J\rho_0(\varepsilon_F) \ln(k_B T/D)]. \quad (2.11)$$

Assim a resistividade total poder ser escrita na seguinte forma

$$R(T) = aT^5 + c_{imp}R_0 - c_{imp}R_1 \ln(k_B T/D), \quad (2.12)$$

onde o primeiro termo vem do espalhamento elétron-fonôn, o segundo termo é devido ao

espalhamento da impureza e o último é o termo mais importante e que está associado ao espalhamento com inversão de spin. Segundo a última equação o mínimo da resistividade em função da temperatura é atingido quando,

$$T_K = T_{min} = \left(\frac{R_1}{5a}\right)^{1/5} c_{imp}^{1/5}, \quad (2.13)$$

e a temperatura onde ocorre esse mínimo, passou a ser conhecida como temperatura de Kondo.

2.2 O modelo de Anderson de uma impureza

O SIAM foi proposto por Anderson para descrever a interação entre um elétron localizado e elétrons não localizados numa banda de condução. Este Hamiltoniano leva em conta a hibridização do elétron localizado com os elétrons da banda de condução. O termo de hibridização, permite a troca de elétrons entre os estados de condução e os estados localizados, que são caracterizados pela energia E_f . A repulsão Coulombiana U , é responsável pelo estado de dupla ocupação. Logo no SIAM, a impureza com um nível de energia discreto E_f e momento magnético μ_m interage com os elétrons na banda de condução, que usualmente são considerados livres. O Hamiltoniano do SIAM é escrito como a soma de três termos, $H_{bath} + H_{impurity} + H_{hibridization}$, com cada termo dado por,

$$\begin{aligned} H_{bath} &= \sum_{k\sigma} \epsilon_k c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma} \\ H_{impurity} &= \sum_{\sigma} E_f f_{\sigma}^\dagger f_{\sigma} + U f_{\uparrow}^\dagger f_{\uparrow} f_{\downarrow}^\dagger f_{\downarrow} \\ H_{hibridization} &= \sum_{k\sigma} V_k (f_{\sigma}^\dagger c_{k\sigma} + c_{k\sigma}^\dagger f_{\sigma}), \end{aligned} \quad (2.14)$$

onde $c_{k\sigma}$ e f_{σ} são operadores fermiônicos de aniquilação para os estados não localizados e localizados, respectivamente, U é a intensidade de repulsão coulombiana e V_k é o potencial de hibridização que no caso geral é dependente do k .

Como exemplo de aplicação do SIAM podemos considerar um SET. Os elétrons no canal balístico no lado esquerdo e direito do QD são capazes de pular dentro e fora do QD, que é representado na Fig. 2.2 pela região no meio das barreiras de potencial. Variando o potencial de porta, o QD com um nível discreto de energia (ϵ_0 e $\epsilon_0 + U$) pode ser sintonizado para estar no regime de Kondo, valência intermediária ou bloqueamento

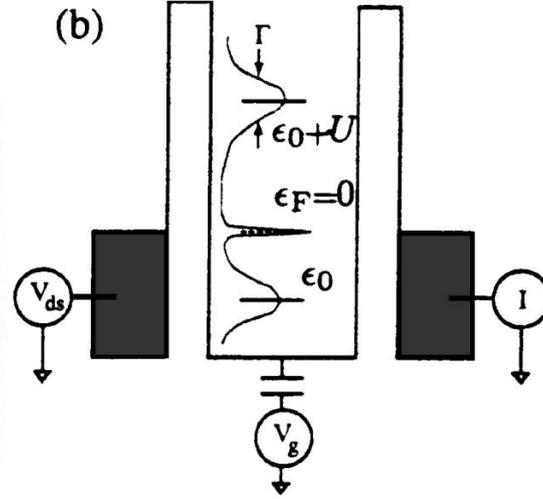


Figura 2.2: Diagrama de um SET. Os canais balísticos estão no lado esquerdo e direito da figura. As barreiras de tunelamento representam o potencial de hibridização V no Hamiltoniano do SIAM. O potencial de porta V_g aplicado no QD permite aos níveis discretos de energia se mover para acima ou para baixo. A voltagem dreno-fonte V_{d-s} , leva o sistema para fora do equilíbrio e é útil para medidas de transporte.

de Coulomb. O efeito do potencial de porta V_g é deslocar os níveis discretos acima ou abaixo da energia de Fermi ϵ_F . Como pode ser visto na Fig. 2.2, onde três ressonâncias aparecem por causa do potencial de hibridização. Duas em torno do valor da energia dos níveis discretos e mais uma na energia de Fermi (23). Esta última é conhecida como a ressonância de Kondo ou Abrikosov-Suhl, e é a assinatura do efeito Kondo.

As simetrias do SIAM foram muito importantes no NRG de Wilson (6, 7). Como foi dito na introdução, o Hamiltoniano do SIAM no NRG foi mapeado num Hamiltoniano de uma cadeia linear semi-infinita. O novo Hamiltoniano que é equivalente a aquele do SIAM tem algumas simetrias, como por exemplo a conservação da carga e do spin total, onde a primeira simetria é responsável pela conservação do número total de partículas. No SIAM será considerado as mesmas simetrias, o operador de carga e o spin total

$$\begin{aligned}
 N &= \sum_k c_{k,\sigma}^\dagger c_{k,\sigma} + f_\mu^\dagger f_\mu \\
 \vec{S} &= \frac{1}{2} \sum_k c_{k,\mu}^\dagger \vec{\sigma}_{\mu\nu} c_{k,\nu} + \frac{1}{2} f_\mu^\dagger \vec{\sigma}_{\mu\nu} f_\nu.
 \end{aligned} \tag{2.15}$$

2.3 O limite de U infinito

Nesta seção vamos estudar o SIAM no limite de correlação Coulombiana infinita, $U \rightarrow \infty$. Será considerado primeiramente o termo da impureza H_{imp} . As representações matriciais dos operadores fermiônicos f_σ e f_σ^\dagger que satisfazem as regras de anticomutação, $\{f_\sigma, f_{\sigma'}^\dagger\} = \delta_{\sigma, \sigma'}$ e $\{f_\sigma, f_{\sigma'}\} = 0$, são dadas pelas seguintes matrizes,

$$\begin{aligned} f_\uparrow^+ &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} & f_\uparrow &= \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\ f_\downarrow^+ &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \end{pmatrix} & f_\downarrow &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (2.16)$$

onde a base que foi usada para escrever estes operadores foi, $\{|0\rangle, |\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle, |\uparrow\downarrow\rangle\}$, que nos permite escrever o hamiltoniano da impureza na forma diagonal

$$H_{imp} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & E_f & 0 & 0 \\ 0 & 0 & E_f & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2E_f + U \end{pmatrix}. \quad (2.17)$$

Pode-se perceber que o estado com dupla ocupação é um estado de alta energia, se U é grande e positivo. Logo no limite $U \rightarrow \infty$ esse estado é bem improvável de ser alcançado por uma excitação, e ele é praticamente proibido e não será considerado em H_{imp} e H_{hib} . Para uma melhor compreensão desta idéia, suponha que ignoramos a quarta linha e a quarta coluna na representação matricial dos operadores fermiônicos em (2.16), reduzindo a dimensão destas matrizes em uma unidade. O resultado disso é o truncamento dos estados deste espaço de Hilbert, e como consequência é obtido um Hamiltoniano de baixa energia e novos operadores X (operadores de Hubbard) que não satisfazem as regras de anticomutação.

Esta restrição nos permite redefinir os operadores fermiônicos para os estados local-

izados da seguinte maneira $f_\sigma \rightarrow X_{0,\sigma}$ e $f_\sigma^\dagger \rightarrow X_{\sigma,0}$, onde o operador de Hubbard $X_{p,q}^f$ num subespaço vetorial f é definido como: $X_f^{pq} = |p\rangle\langle q|$, com $|p\rangle, |q\rangle$ pertencendo à alguma sub-base naquele subespaço. Para dois operadores de Hubbard no mesmo subespaço vetorial, a regra de multiplicação é dada na equação abaixo

$$X_f^{pq} X_f^{rs} = \delta_r^q X_f^{ps}, \quad (2.18)$$

onde esta propriedade é mostrada simplesmente segundo a definição dos operadores de Hubbard $X_f^{pq} = |p\rangle\langle q|$.

Com a ajuda dos operadores de Hubbard, o Hamiltoniano do SIAM pode ser escrito da seguinte maneira

$$H = \sum_{k\sigma} \varepsilon_k c_{k,\sigma}^\dagger c_{k,\sigma} + \sum_{\sigma} E_f X_{\sigma,\sigma} + \sum_{k\sigma} V_k (X_{\sigma,0} c_{k\sigma} + c_{k\sigma}^\dagger X_{0,\sigma}). \quad (2.19)$$

Devemos notar que este Hamiltoniano efetivo é linear nos operadores de Hubbard X_{pq} , e linear e bilinear em $c_{k,\sigma}$. Além disso, o termo de alta energia de quarta ordem nos operadores fermiônicos está ausente. A partir deste resultado poderia se acreditar que o problema é trivialmente solucionado dentro do formalismo das “Green’s functions” (GF’s), mas não é isso que ocorre porque ao se fazer a projeção dos estados de dupla ocupação para o infinito, o efeito da correlação Coulombiana se reflete na complicada álgebra dos operadores X , que agora satisfazem uma algebra tipo momento angular que não permite mais a aplicação do teorema de Wick. Ou seja, o preço pago para se trabalhar com os operadores de Hubbard é a perda da validade do teorema de Wick, entretanto existe uma extensão desse teorema, para o caso dos operadores X de Hubbard, que é o teorema de Yang-Wang (24), que porém é de difícil aplicação, ou seja, o problema continua sendo um típico problema de sistemas fortemente correlacionados.

A técnica de expansão em cumulantes será revisada na Sec. 2.5. Por último vamos mencionar a incorporação de um termo Zeeman devido a um campo magnético aplicado ao longo da direção z atuando sobre os elétrons localizados

$$H_{iz} = (\mu_B g / 2\hbar) B (X_i^{\uparrow,\uparrow} - X_i^{\downarrow,\downarrow}), \quad (2.20)$$

onde B é a intensidade do campo magnético, g é o fator de Landé para os elétrons localizados μ_B é o magneton de Bohr. O efeito resultante desse termo é quebrar a degenerescência

dos níveis localizados em novos níveis com energias diferentes, mas cuja diferença entre níveis adjacentes é $(\mu_B g / \hbar)B$. Do mesmo modo teremos a renormalização do nível localizado que passa a ser escrito como $E_{f,\sigma} = E_f + \sigma \mu_B g B / 2\hbar$.

2.4 O método da equação de movimento

A função de Green retardada dependente do tempo é definida como,

$$\langle\langle A(t); B(t') \rangle\rangle = -i\theta(t-t')\langle[A(t), B(t')]_{\pm}\rangle, \quad (2.21)$$

onde os parênteses angulares no segundo membro da equação, se referem a média sobre o ensemble grande canônico, $\langle\dots\rangle = Sp(e^{-\beta\mathcal{H}} \dots) / Sp(e^{-\beta\mathcal{H}})$, com $\mathcal{H} = H - \mu N$ e a dependência temporal dos operadores é escrita na representação de Heisenberg, $A(t) = e^{i\mathcal{H}t} A e^{-i\mathcal{H}t}$.

Pela definição dada acima da GF, um conjunto de diferentes GF's é obtido quando $A(t)$ e $B(t')$ são trocadas por combinações dos operadores de criação e destruição dos estados localizados e não localizados, f_{μ} e $c_{k,\sigma}$. Embora, quantidades físicas como o deslocamento de fase, a densidade espectral da impureza, a magnetização, etc. são dadas em termos da função de Green da impureza, $G_{f_{\sigma},f_{\sigma}} = \langle\langle f_{\sigma}(t); f_{\sigma}^{\dagger}(t') \rangle\rangle$, outras funções de Green existem e elas também podem ser úteis em algum momento, elas são a GF cruzada e a GF dos elétrons de condução $G_{c_{k\sigma},f_{\sigma}} = \langle\langle c_{k\sigma}(t); f_{\sigma}^{\dagger}(t') \rangle\rangle$, $G_{c_{k\sigma},c_{k'\sigma}} = \langle\langle c_{k\sigma}(t); c_{k'\sigma}^{\dagger}(t') \rangle\rangle$, respectivamente. Então, segundo a definição da GF, vamos achar primeiro aquela da impureza, depois um conjunto de equações diferenciais para as diferentes GF's. Para achar uma expressão para a GF da impureza, precisamos conhecer os autoestados do Hamiltoniano, que são normalmente desconhecidos. Mas por enquanto, vamos supor que podemos achá-los. Escrevemos a média termodinâmica em termos destes autoestados e obteremos logo depois de uma álgebra muito simples o seguinte resultado (25)

$$\langle\langle f_{\sigma}(t); f_{\sigma}^{\dagger}(t') \rangle\rangle_{+} = \frac{\sum_{n,m} |\langle n | f_{\sigma} | m \rangle|^2 e^{i(E_n - E_m)(t-t')} (e^{-\beta E_n} + e^{-\beta E_m})}{\sum_n e^{-\beta E_n}}. \quad (2.22)$$

Efetuada a transformada de Fourier de $G_{f_{\sigma},f_{\sigma}}(t,t')$, obtemos a GF no domínio das frequências. É importante dizer que a troca, $\omega \rightarrow \omega + i\delta$, foi feito só para garantir a con-

vergência. O resultado final para a GF da impureza é,

$$G_{f_\sigma, f_\sigma}(\omega) = e^{\beta\Omega} \sum_{n,m} |\langle n | f_\sigma | m \rangle|^2 \frac{e^{-\beta E_n} + e^{-\beta E_m}}{\omega + i\delta - (E_m - E_n)}. \quad (2.23)$$

Agora estamos em condições de escrever um conjunto de equações diferenciais empregando a técnica da “equation of motion” (EOM), onde logo depois de derivar a GF é obtido GF’s de ordem superior que possuem uma maior hierarquia que a GF inicial. Esta técnica para achar GF’s é já bem conhecida, e a partir dela é possível encontrar um conjunto de equações diferenciais acopladas que quando solucionadas nos fornecem muita informação sobre a física do problema. No momento vai ser tomado a transformada de Fourier da derivada da GF obtendo o seguinte resultado,

$$\omega \langle \langle A; B \rangle \rangle_\omega = \frac{1}{2\pi} \langle [A, B]_+ \rangle + \langle \langle [A, H]; B \rangle \rangle_\omega \quad (2.24)$$

onde $\langle \langle A; B \rangle \rangle_\omega$ é a transformada de Fourier de $\langle \langle A(t); B(t') \rangle \rangle$. Para o SIAM e para a função de Green da impureza, $\langle \langle f_\sigma; f_\sigma^\dagger \rangle \rangle$ é obtido o seguinte conjunto de equações quando o Hamiltoniano na transformada de Fourier da GF é substituído pelo hamiltoniano do SIAM,

$$\begin{aligned} (\omega - E_{f,\sigma}) G_{f_\sigma, f_\sigma}(\omega) - U \Gamma_{f,f}(\omega) &= 1 + \sum_{\mathbf{k}} V_{\mathbf{k}} G_{k\sigma, f_\sigma}(\omega) \\ (\omega - \varepsilon_{k,\sigma}) G_{k\sigma, f_\sigma}(\omega) &= V_{\mathbf{k}}^* G_{f_\sigma, f_\sigma}(\omega) \\ (\omega - \varepsilon_{k,\sigma}) G_{k\sigma, k'\sigma}(\omega) &= \delta_{k,k'} + V_{\mathbf{k}}^* G_{f_\sigma, k'\sigma}(\omega), \end{aligned} \quad (2.25)$$

na equação (2.25) a função de Green da impureza é dada pela transformada de Fourier da GF no domínio dos tempos, $G_{f_\mu, f_\nu}(t_1, t_2)$, e o mesmo é feito para as outras GF’s, com a exceção de $\Gamma_{f,f}(\omega)$, que é dada pela transformada de Fourier de $\langle \langle f_\sigma n_{f\bar{\sigma}}(t_1); f_\sigma^\dagger(t_2) \rangle \rangle$.

2.5 Expansão em cumulantes

Nesta seção será explicado brevemente a expansão em cumulantes para a função de Green do PAM. A GF do SIAM será obtida a partir do formalismo para o PAM quando a soma sobre as impurezas é reduzida a um sítio só. Esta seção está principalmente baseada nos artigos (26–28).

Os primeiros sistemas Kondo a serem estudados foram sistemas metálicos com impurezas magnéticas diluídas, tais como matrizes metálicas de ouro ou cobre com quantidades muito pequenas de ferro diluídas. Ligas de nióbio *No* e molibdênio *Mb* com impurezas magnéticas de ferro também foram estudadas, (veja a tabela 1.1). Nestes compostos, conhecidos como Kondo diluídos, a concentração de impurezas magnéticas era muita baixa; em torno de 100 ppm (partes por milhão). Como foi discutido na Sec. 2.1 o espalhamento de inversão de spin leva o sistema a exibir o efeito Kondo nestes compostos, i.e. a blindagem do spin localizado pelos elétrons de condução e a formação de um líquido de Fermi com uma baixa escala de energia, estabelecida pela temperatura de Kondo, T_K .

Porém, quando a concentração de impurezas cresce, o que deveria ser esperado? será possível que um sistema com um arranjo periódico de elétrons localizados interagindo com elétrons não localizados possa exibir o efeito Kondo também? Perguntas parecidas e outras foram feitas quando as primeiras medidas de compostos Kondo concentrados e férmions pesados foram descobertos (10). Nos sistemas concentrados, a desordem induzida pela interação entre as impurezas leva o sistema a apresentar fases como o vidro de spin ou a apresentar algum tipo de ordenamento magnético. Porém, nos férmions pesados e nos isolantes de Kondo há uma competição entre o efeito Kondo que tenta desmagnetizar o sistema, e a interação RKKY que tenta induzir ordem magnética.

A área de pesquisa dos férmions pesados começou o seu desenvolvimento a partir da descoberta do primeiro férmion pesado por Andres, Graebner e Ott em 1975 (10), que mediram um enorme coeficiente γ do calor específico no $CeAl_3$. Também Maple e Wohleben estudaram as propriedades magnéticas das ligas intermetálicas com cério *Ce*, e Ted Geballe pesquisou o material SmB_6 (isolante de Kondo) (29); veja a tabela 1.1. A primeira surpresa destes materiais foi que sua susceptibilidade magnética χ na fase metálica era do tipo Pauli, diferente do resto dos metais com terras raras. A segunda surpresa foi que a partir das medidas de Cv/T , a massa efetiva obtida estava em torno de 50 – 100 (massa efetiva) em relação à massa dos elétrons livres.

Do ponto de vista teórico, as propostas mais comuns para descrever estes compostos, agrupados sob o nome de sistemas fortemente correlacionados, foram o modelo de Hubbard, o modelo com uma interação de troca s-d, o modelo de Anderson de uma impureza, o modelo de Anderson periódico, e o modelo p-d de óxidos de cobre. A seguir

estudaremos a expansão em cumulantes para o modelo de Anderson.

Na derivação foi considerado o ensemble grande canônico ao invés do canônico, logo será escrito primeiramente o Hamiltoniano neste esquema

$$\mathcal{H} = H - \mu \left\{ \sum_{\vec{k},\sigma} c_{\vec{k},\sigma}^\dagger c_{\vec{k},\sigma} + \sum_{i\alpha} v_\alpha X_i^{\alpha\alpha} \right\}, \quad (2.26)$$

onde

$$H = \sum_{\vec{k},\sigma} E_{\vec{k},\sigma} c_{\vec{k},\sigma}^\dagger c_{\vec{k},\sigma} + \sum_{i\sigma} E_{i\sigma} X_i^{\sigma\sigma} + \sum_{i\vec{k}\sigma} (V_{i\vec{k}\sigma} X_i^{(o\sigma)\dagger} c_{\vec{k}\sigma} + V_{i\vec{k}\sigma}^* c_{\vec{k}\sigma}^\dagger X_i^{o\sigma}), \quad (2.27)$$

e μ é o potencial químico, $X_i^{\alpha\alpha}$ o número de ocupação do estado $|\alpha\rangle$ e v_α o número de elétrons nesse estado. É possível perceber que o termo que multiplica o potencial químico é o operador número de partículas. A transformação indicada pela Eq. (2.26) é obtida substituindo-se as energias $E_{i\alpha}$ de todos os estados iônicos $|\alpha\rangle$ por

$$\varepsilon_{i\alpha} = E_{i\alpha} - \mu v_\alpha, \quad (2.28)$$

e as energias $E_{\vec{k}\sigma}$ dos estados de condução por

$$\varepsilon_{\vec{k}\sigma} = E_{\vec{k}\sigma} - \mu. \quad (2.29)$$

Para derivar a expansão perturbativa do potencial grande canônico e das GF's em presença de campos externos $\xi_\gamma(\tau)$ não nulos, vamos incluir no Hamiltoniano total \mathcal{H} o operador Hamiltoniano da forma

$$H_e(\xi) = - \sum_\gamma \xi_\gamma(\tau) Y_\gamma = H_e[\xi(\tau)], \quad (2.30)$$

onde os operadores independentes do tempo Y_γ descrevem tanto operadores X de Hubbard para os elétrons f quanto operadores ordinários de criação e destruição para os elétrons de condução e os coeficientes γ abreviam todos os índices necessários para descrever esses operadores. Os campos externos $\xi_\gamma(\tau)$ são variáveis de Grassmann (26) e anti-comutam entre si e com os operadores Y_γ , de modo que, $H_e(\xi)$ é um operador tipo-bóson. A segunda igualdade enfatiza que, mesmo na representação de Schrödinger, $H_e(\xi)$ é função de τ através da dependência com os ξ .

A função de Green na presença de campos externos, ξ , é definida como a média,

$$G^f(j_i, \dots, m_i; \xi) = \frac{\text{Tr}[\hat{X}_{j_i; \alpha \sigma} \dots \hat{X}_{m_i; \gamma \lambda} S_{\mathcal{H}_0}^0(\beta) \varepsilon(\beta, \xi)]_+}{\text{Tr}[S_{\mathcal{H}_0}^0(\beta) \varepsilon(\beta, \xi)]} \quad (2.31)$$

onde $S_{\mathcal{H}}^0(\beta) \varepsilon(\beta, \xi)$ é o peso estatístico, e cada fator nesse produto é dado por,

$$S_{\mathcal{H}_0}^0(\beta) = \exp_+ \left\{ - \int_0^\beta d\tau H_h(\tau) \right\} \quad (2.32)$$

$$\varepsilon(\beta, \xi) = \exp_+ \left\{ - \int_0^\beta d\tau H_e(\tau, \xi) \right\}. \quad (2.33)$$

Os operadores $H_h(\tau)$ e $H_e(\tau, \xi)$ são escritos na representação de Dirac ou de interação, e é possível expandir $S_{\mathcal{H}_0}^0(\beta)$ ou $\varepsilon(\beta, \xi)$ numa série de Taylor. Estas duas possibilidades de expansão produzem diferentes regras diagramáticas, os quais coincidem no limite $\xi = 0$. Neste trabalho vai ser seguido a ref. (26), onde foi escolhido expandir $S_{\mathcal{H}_0}^0(\beta)$ porque as regras diagramáticas são simplesmente as mesmas que foram derivadas para $\xi = 0$. Na expansão em cumulantes da rede de Anderson que está sendo discutida aqui, será a hibridização que vai aparecer na expansão perturbativa e não o “hopping” como é feito em outros casos. A solução exata do problema dos elétrons de condução na ausência de hibridização é parte do Hamiltoniano de ordem zero. Um termo comum na expansão da função de partição $\mathcal{Z}(\beta, \xi)$ é,

$$\frac{(-1)^n}{n!} \mathcal{Z}_0(\beta, \xi) \int_0^\beta d\tau_1 \sum_{l_1, l'_1} V(l_1, l'_1) \dots \int_0^\beta d\tau_n \sum_{l_n, l'_n} V(l_n, l'_n) \langle [\hat{X}_{l_1; \alpha \sigma} \hat{X}_{l'_1; \kappa \eta} \dots \hat{X}_{l_n; \gamma \lambda} \hat{X}_{l'_n; \sigma \alpha}]_+ \rangle^\xi, \quad (2.34)$$

onde “a média ξ , $\langle \dots \rangle^\xi$, é igual à soma dos produtos dos cumulantes correlacionados onde cada termo corresponde a uma partição dos argumentos l_1, l_2, \dots, l_n e cada possível partição aparece uma e somente uma vez.” A afirmação entre aspas é o teorema 3.1. em (26), este é um resultado importante porque ele fornece uma regra de redução que é análoga ao teorema de Wick. A diferença entre o teorema 3.1. e o teorema de Wick aparece nas álgebras diferentes dos operadores de Hubbard por um lado e dos operadores de Fermi e Bose por outro lado. O teorema de Wick está baseado no fato de que o comutador de operadores de Fermi e Bose é um número, enquanto para os operadores de Hubbard seu comutador é outro operador e por causa disso o teorema de Wick não é mais válido.

Uma vez que o teorema 3.1 é aplicado, o passo seguinte é calcular o valor dos novos

cumulantes gerados. Neste caso a média dos operadores de Hubbard é achada com a função de partição não perturbada $\mathcal{Z}_0(\beta, \xi)$, i.e. $H_h = 0$.

$$\langle [\hat{X}_{l_1; \alpha\sigma} \dots \hat{X}_{l_n; \kappa\eta}]_+ \rangle_c^\xi = \frac{\delta^n \ln[\mathcal{Z}_0(\beta, \xi)]}{\delta \xi(l_1) \dots \delta \xi(l_n)}. \quad (2.35)$$

Dois exemplos comuns na expansão em cumulantes são,

$$\begin{aligned} \langle (\hat{X}_1 \hat{X}_2)_+ \rangle_c^\xi &= \langle (\hat{X}_1 \hat{X}_2)_+ \rangle_c^\xi + \langle (\hat{X}_1)_+ \rangle_c^\xi \langle (\hat{X}_2)_+ \rangle_c^\xi \\ \langle (\hat{X}_1 \hat{X}_2 \hat{X}_3)_+ \rangle_c^\xi &= \langle (\hat{X}_1 \hat{X}_2 \hat{X}_3)_+ \rangle_c^\xi + \langle (\hat{X}_1)_+ \rangle_c^\xi \langle (\hat{X}_2 \hat{X}_3)_+ \rangle_c^\xi \\ &\quad - \langle (\hat{X}_2)_+ \rangle_c^\xi \langle (\hat{X}_1 \hat{X}_3)_+ \rangle_c^\xi + \langle (\hat{X}_3)_+ \rangle_c^\xi \langle (\hat{X}_1, \hat{X}_2)_+ \rangle_c^\xi \\ &\quad + \langle (\hat{X}_1)_+ \rangle_c^\xi \langle (\hat{X}_2)_+ \rangle_c^\xi \langle (\hat{X}_3)_+ \rangle_c^\xi. \end{aligned} \quad (2.36)$$

Finalmente a GF é obtida quando todos os termos na expansão de $S_{\mathcal{H}_0}^0(\beta)$ são achados e somados por meio do método dos cumulantes. O resultado é uma soma de diferentes cumulantes e produtos de cumulantes de ordem zero até o infinito. Como nos diagramas de Feynmann, é possível arranjar todos aqueles termos que contribuem à GF exata $G_{ff,\sigma}(\mathbf{k}, z)$ supondo a existência de um cumulante efetivo $M_{2,\sigma}^{eff}(\mathbf{k}, z)$, que é dado pelos diagramas de $G_{ff,\sigma}(\mathbf{k}, z)$ que não podem ser separados pelo corte de uma linha no diagrama, estes diagramas são chamados diagramas “próprios” ou “irredutíveis”. A GF exata para os elétrons f é escrita como,

$$G_{f,\sigma}(\mathbf{k}, z) = \frac{M_{2,\sigma}^{eff}(\mathbf{k}, z)}{1 - |V(\mathbf{k})|^2 G_{c,\sigma}^0(\mathbf{k}, z) M_{2,\sigma}^{eff}(\mathbf{k}, z)}, \quad (2.37)$$

onde $G_{c,\sigma}^0(\mathbf{k}, z) = -1/[z - E(\mathbf{k})]$. Para uma melhor compreensão dos resultados acima, é bom discutir um pouco a “chain approximation” (CHA) desenvolvida em (28). Esta aproximação leva em conta na expansão diagramática, somente cumulantes de segunda ordem, (ver Fig. 2.3), onde $G_{j'\alpha';j\alpha}^f(z)$ e $G_{\mathbf{k}',\sigma';\mathbf{k},\sigma}^{cc}(z_n)$ são representados por quadrados cheios e vazios, respectivamente. O significado dos símbolos nos diagramas dos cumulantes é o seguinte:

O “vértice” $\bullet = G_{f,0\sigma}^o(z_n) = -D_{0\sigma}/(z_n - \varepsilon_{f,\sigma})$ é o cumulante de ordem zero da GF para os elétrons f , onde $D_{0\sigma} = \langle X_{o0} \rangle + \langle X_{\sigma\sigma} \rangle$.

O “vértice” $\circ = G_{c,\mathbf{k}\sigma}^o(z_n) = -1/(z_n - \varepsilon_{\mathbf{k}\sigma})$ é o cumulante de ordem zero da GF dos elétrons c .

Finalmente as linhas que ligam dois vértices estão associadas com a perturbação de hibridização. Quando a linha aponta para o vértice f associamos $\leftarrow = V_{j,\mathbf{k},\sigma}$, enquanto associamos $\leftarrow = V_{j,\mathbf{k},\sigma}^*$ quando ela aponta para o vértice de condução.

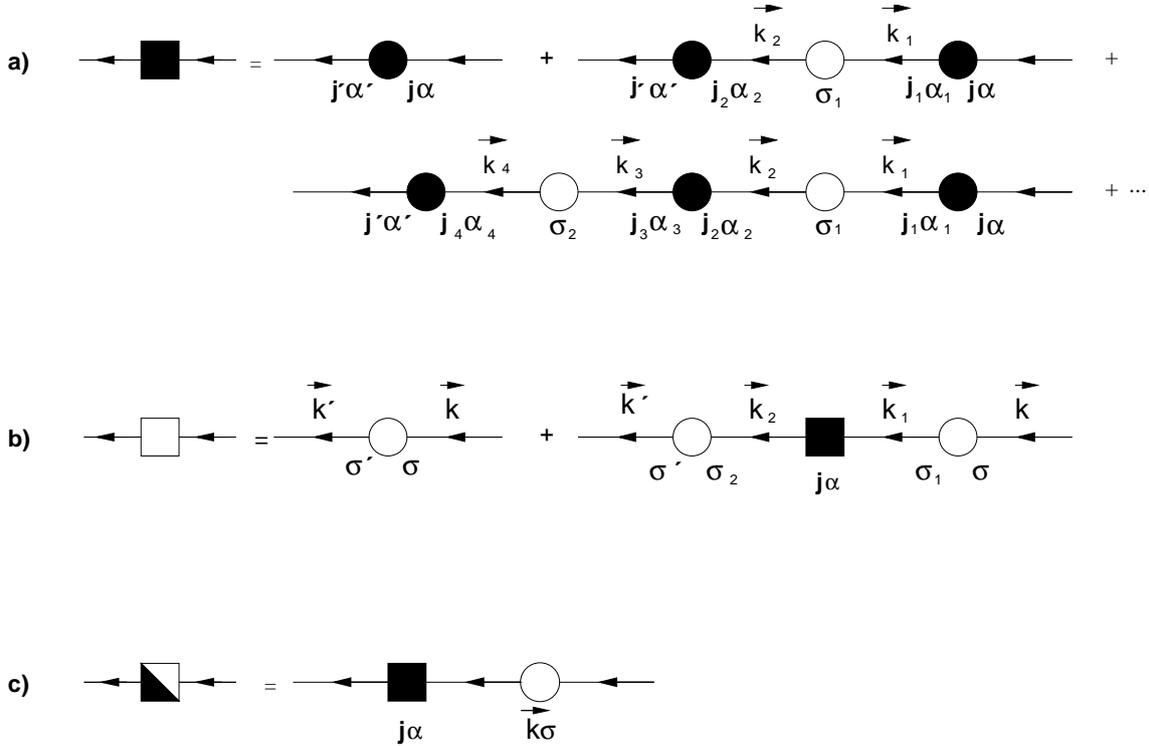


Figura 2.3: Diagramas das funções de Green na aproximação da cadeia. Os círculos cheios correspondem aos cumulantes dos elétrons f , e os círculos vazios correspondem aqueles dos elétrons c . As linhas que unem dois vértices representam a hibridização, aqui tratada como perturbação. (a) Diagrama para a GF dos elétrons f na CHA. O diagrama nessa aproximação para estes elétrons, $G_{j_i\alpha_i, j_f\alpha_f}^{ff}(i\omega_n)$, é representado pelo quadrado cheio à esquerda. (b) A expansão perturbativa para a função $G_{\mathbf{k}',\sigma';\mathbf{k},\sigma}^{cc}(z_n)$ dos elétrons c na CHA é representada pelo quadrado vazio à esquerda. (c) Diagrama para a GF dos elétrons $f-c$ na CHA. A função $G_{\mathbf{j};\mathbf{k},\sigma}^{fc}(z_n)$ é representada pelo quadrado semi-cheio no lado esquerdo.

Considere o terceiro termo na expansão diagramática da GF $G^{ff}(z)$, esse termo está ausente na Fig. 2.3, mas ele será desenhado aqui, $\leftarrow \bullet \leftarrow \circ \leftarrow \bullet \leftarrow \circ \leftarrow \bullet \leftarrow \circ \leftarrow \bullet \leftarrow$. No caso da impureza só existe uma impureza num sítio j , e devido a isso, cada soma no índice interno j_r é reduzida a somente um termo com $j' = j$. Além do anterior, também é considerado que a hibridização é completamente local, $V_\sigma(\mathbf{k}) = V$. Com as hipóteses acima cada par $\leftarrow \circ \leftarrow \bullet$ é igual aos termos da expansão diagramática e ela é dada por,

$$G_{f,\alpha}^0(z_n)|V|^2 \sum_{\mathbf{k}} G_{c,\mathbf{k}\sigma}^0(z_n) = G_{f,\alpha}^0(z_n)N_\sigma(z_n), \quad (2.38)$$

onde $N_\sigma(z_n) = |V|^2 \sum_{\mathbf{k}} G_{c,\mathbf{k}\sigma}^0(z_n)$. No caso da impureza o nível de complexidade foi reduzido e os resultados parecem bem mais simples, é possível escrever o terceiro termo da expansão como $\leftarrow \bullet \left\{ \leftarrow \circ \leftarrow \bullet \right\}^3$. Fazendo o mesmo processo para todos os outros termos da expansão diagramática e com a ajuda da série geométrica é simples obter,

$$G_{j'\alpha';j\alpha}^{ff}(z_n) = \delta_{j,j'} \delta_{\alpha,\alpha'} \frac{G_{f,\alpha}^0(z_n)}{1 - G_{f,\alpha}^0(z_n)N_\sigma(z_n)}. \quad (2.39)$$

Este último resultado para a GF localizada obtido na CHA, pode ser escrito de uma forma muito mais simples de tal modo que possa mostrar a analogia com a Eq. 2.37. Esta tentativa de mostrar a analogia não é uma demonstração formal da Eq. 2.37, ao contrário, ela é simplesmente um exemplo da validade da CHA na expansão em cumulantes. A GF atômica localizada está relacionada com o cumulante atômico através de, $G_{f,\alpha}^0(z_n) \rightarrow M_{2,\alpha}^{CHA}(z_n)$, e a expressão de N_α é substituída para se obter,

$$G_\alpha^{ff}(z_n) = \frac{M_{2,\alpha}^{CHA}(z_n)}{1 - M_{2,\alpha}^{CHA}(z_n)|V|^2 \sum_{\mathbf{k}} G_{c,\mathbf{k}\sigma}^0(z_n)}. \quad (2.40)$$

Veja que as expressões nas Eq. 2.37 e 2.40 são muito parecidas. A diferença entre elas está somente no cumulante, para uma é $M_{2,\sigma}^{eff}(\mathbf{k}, z)$ e para a outra é $M_{2,\alpha}^{CHA}(z_n)$. Finalmente a CHA nos fornece aproximações das funções de Green simples mas úteis, obtidas na expansão de cumulantes levando em conta a soma infinita de todos os diagramas que contém vértices iônicos com somente duas linhas. O trabalhoso cálculo da formulação geral (2.37) foi bem simplificado neste caso, e foi dada uma curta descrição da técnica no caso da impureza. Os diagramas no espaço real que contribuem à CHA foram desenhados na Fig. 2.3.

2.6 Ressonância e deslocamento de fase

Nessa seção vamos expressar a GF dos elétrons de condução em termos da GF localizada, será obtido que a matriz de transferência, \mathcal{T} para a dispersão de muitos corpos é uma função somente da GF localizada. Para conseguir este propósito, derivamos

$\langle\langle f_\sigma(t_1); c_{k',\sigma}^\dagger(t_2) \rangle\rangle$ em função de t_2 e depois tomamos a transformada de Fourier obtendo,

$$(\omega - \xi_{k'})G_{f_\sigma,k'\sigma}(\omega) = V_{\mathbf{k}'}G_{f_\sigma,f_\sigma}(\omega). \quad (2.41)$$

Substituindo a última equação na terceira de 2.25 obtemos o seguinte resultado, que é parecido com aquele da definição da matriz \mathcal{T}

$$G_{k\sigma,k'\sigma}(\omega) = \frac{\delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}}{\omega - \varepsilon_k} + \frac{V_{\mathbf{k}}^*}{\omega - \varepsilon_k}G_{f_\sigma,f_\sigma}(\omega)\frac{V_{\mathbf{k}'}}{\omega - \varepsilon_{k'}}. \quad (2.42)$$

Então a matriz de espalhamento de muitos corpos é dada por, $\mathcal{T}_{k,k'} = V_{\mathbf{k}}^*G_{f_\sigma}(\omega)V_{\mathbf{k}'}$. Agora, conhecendo aquele operador vamos calcular o deslocamento de fase e com algumas propriedades das GF's estabeleceremos uma relação com a densidade de estados da impureza. Para dar um exemplo do deslocamento de fase, este será calculado no caso sem repulsão coulombiana, $U = 0$. Nesse exemplo, a GF da impureza é obtida quando $G_{k\sigma,k'\sigma}$ da segunda equação de (2.25) é substituída na primeira equação do mesmo grupo de equações. Logo no caso sem repulsão coulombiana a GF da impureza é,

$$G_{f_\sigma,f_\sigma}(\omega) = \frac{1}{\omega - E_{f_\sigma} - \sum_k \frac{|V_k|^2}{\omega - \varepsilon_{k\sigma}}}. \quad (2.43)$$

A mudança na densidade de estados $\rho_{imp}(\omega) = \rho(\omega) - \rho_0(\omega)$, devido a adição da impureza é dada por, $\Delta\rho(\omega) = -\frac{1}{\pi}Im(G^+(\varepsilon) - G_0^+)$, onde G^+ é a GF dos elétrons de condução $G_{k\sigma,k'\sigma}(\omega)$ somada com a GF da impureza G_{f_σ,f_σ} e G_0^+ é a GF livre (aquela onde o potencial de hibridização é zero). É obtido o seguinte valor do traço da G^+ na equação (2.42),

$$\begin{aligned} Tr(G^+(\omega)) &= \sum_k \frac{1}{\omega - \xi_k} + \sum_k G_{f_\sigma,f_\sigma} \frac{|V_k|^2}{(\omega - \xi_k)^2} + G_{f_\sigma,f_\sigma} \\ &= \sum_k \frac{1}{\omega - \xi_k} + \frac{\partial}{\partial \omega} \ln \left(\omega - E_{f_\sigma} - \sum_k \frac{|V_k|^2}{\omega - \xi_{k\sigma}} \right). \end{aligned} \quad (2.44)$$

Percebe-se que o primeiro termo na equação (2.44) é o traço de uma GF para férmions livres, então da definição dada acima para a mudança da densidade de estados obtemos que,

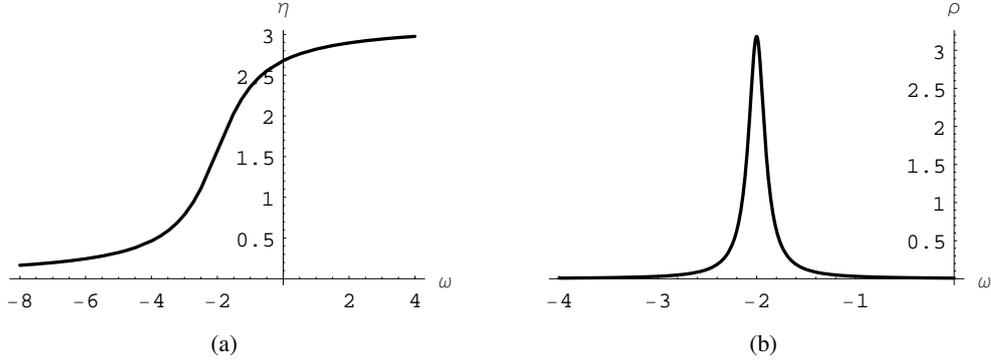


Figura 2.4: Na figura (a) é graficado o deslocamento de fase em função de ω segundo a Eq. 2.46. Na figura (b) a ressonância gerada pelo deslocamento de fase em (a) apresenta-se como uma lorentziana na densidade de estados.

$$\Delta\rho(\omega) = \frac{1}{\pi} \frac{\partial}{\partial\omega} (-Im \ln[G_{f\sigma, f\sigma}(\omega)^{-1}]). \quad (2.45)$$

A quantidade em parênteses é conhecida como o deslocamento de fase $\eta(\omega)$, e é dada por, $\eta(\omega) = -\tan^{-1}(\Delta(\xi_k)/(\omega - E_{f\sigma} - \Lambda(\xi_k)))$, onde $\Delta(\xi_k) = -Im \sum_k |V_k|^2 / (\omega - \xi_k)$ e $\Lambda(\xi_k) = P \sum_k |V_k|^2 / (\omega - \xi_k)$; P quer dizer o valor principal. Levando em conta algumas propriedades das funções trigonométricas inversas obtemos para o deslocamento de fase,

$$\eta(\omega) = \frac{\pi}{2} - \tan^{-1} \left[\frac{E_{f\sigma} + \Lambda(\xi_k) - \omega}{\Delta(\xi_k)} \right]. \quad (2.46)$$

Se $E_{f\sigma}$ fica bem no interior da banda de condução então o deslocamento de fase perto do nível $E_{f\sigma}$ da impureza é aproximadamente dado por $\eta(\omega) = \frac{\pi}{2} - \tan^{-1} \left[\frac{\tilde{E}_{f\sigma} - \omega}{\Delta} \right]$, onde $\tilde{E}_{f\sigma}$ é a solução de, $E_{f\sigma} + \Lambda(\xi_k) - \omega = 0$. A densidade local de estados $\Delta\rho(\omega)$ é escrita como,

$$\Delta\rho(\omega) = \frac{1}{\pi} \frac{\partial\eta}{\partial\omega} = \frac{\Delta/\pi}{(\omega - \tilde{E}_{f\sigma})^2 + \Delta^2}. \quad (2.47)$$

O gráfico desta função é uma lorentziana com centro em $\tilde{E}_{f\sigma}$ e com uma altura dada por, $1/\pi\Delta$, como pode ser visto na Fig. 2.4. Então o resultado na densidade de estados pela introdução de um nível localizado sem correlação coulombiana é o aparecimento de uma ressonância centrada perto de E_f e com altura inversamente proporcional a Δ .

2.7 A regra da soma de Friedel

Um caso especial do conjunto de equações 2.25 é aquele onde a repulsão coulombiana é diferente de zero, nesse caso não existe uma solução analítica para o conjunto, embora existam boas aproximações que conseguem levar em consideração muitos aspectos da física do problema. No entanto, pode-se considerar que é possível desenvolver alguma expansão perturbativa até qualquer ordem que melhor se aproxime da solução analítica. Esta função de Green aproximada da impureza será da forma da Eq. 2.43, com a diferença de um termo que vai ser adicionado ao denominador,

$$G_{f\sigma,f\sigma}(\omega) = \frac{1}{i\omega_n + \mu - E_{f,\sigma} + i\Delta \text{sgn}(\omega_n) - \Sigma_\sigma(i\omega_n)}. \quad (2.48)$$

Na equação anterior, $\Sigma_\sigma(i\omega_n)$ é a auto-energia, e $-i\Delta \text{sgn}(\omega_n)$ é o valor da soma $\sum_k \frac{|V_k|^2}{i\omega_n + \mu - \epsilon_k}$ no limite de largura da banda infinita, $D \rightarrow \infty$. Perceba-se que a transformação $i\omega_n + \mu \rightarrow \omega$ nos leva das funções de Matsubara até as GF's no eixo real a $T = 0$. A auto-energia satisfaz os resultados exatos a $T = 0$ da tabela abaixo, que são amplamente aceitos e que aparecem por exemplo no livro de Hewson (22), e no artigo de Langreth (31). Estes resultados determinam que o comportamento do sistema será aquele de um líquido de Fermi.

- (i) $\Sigma_\sigma(\omega \pm s) = \Sigma_\sigma^R(\omega) \mp i\Sigma_\sigma^I(\omega)$, onde $\Sigma_\sigma^I(\omega) \geq 0$ para $s \rightarrow +0$.
- (ii) $\Sigma_\sigma^I(\omega)$ é zero na energia de Fermi.
- (iii) $\Sigma_\sigma^I(\omega) \propto \omega^2$ como $\omega \rightarrow \epsilon_F$.
- (iv) $\int_{-\infty}^{\epsilon_F} \frac{\partial \Sigma_\sigma(\omega)}{\partial \omega} G_{\sigma,\sigma}(\omega) d\omega = 0$.

Agora vamos calcular o número de ocupação dos elétrons f a partir da densidade espectral a $T = 0$. Esta densidade é obtida da Eq. 2.48, e com um pouco de álgebra pode ser obtido que,

$$-\frac{1}{\pi} \text{Im} G_{f,\sigma} = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \left\{ \frac{\partial \ln[G_{f,\sigma}^{-1}]}{\partial \omega} + G_{f,\sigma} \frac{\partial \Sigma_\sigma(\omega)}{\partial \omega} \right\}. \quad (2.49)$$

Este último resultado é fundamental porque no momento de integrar a densidade espectral para obter as ocupações, o termo que contém a derivada parcial da auto-energia desaparece devido ao resultado (iv)

$$n_{f,\sigma} = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \int_{-\infty}^{\epsilon_F} \frac{\partial \ln[G_{f,\sigma}^{-1}]}{\partial \omega} d\omega = -\text{Im} \frac{1}{\pi} \ln \left\{ \omega^+ - E_f + i\Delta - \Sigma_\sigma(\omega^+) \right\} \Big|_{-\infty}^{\epsilon_F}, \quad (2.50)$$

desenvolvendo os cálculos da integral acima, lembrando das propriedades da \arctan , e sabendo que o valor da primitiva é zero em infinito, podemos obter que

$$n_{f,\sigma} = \frac{1}{2} - \frac{1}{\pi} \tan^{-1} \left(\frac{E_f - \varepsilon_F + \Sigma_{\sigma}^R(\varepsilon_F)}{\Delta} \right), \quad (2.51)$$

onde foi usado o resultado (ii) que satisfaz a auto-energia, $\Sigma_{\sigma}(\omega)$. Podemos observar que as expressões para a ocupação, Eq. 2.51, e para o deslocamento de fase, Eq. 2.46, têm a mesma forma, chegando-se a acreditar que, $\eta_{\sigma}(\varepsilon_F) = \pi n_{d,\sigma}$, seja um resultado exato. Isto não é estranho porque segundo o Ansatz de Bethe, que é uma das poucas técnicas analíticas que consegue solucionar exatamente o hamiltoniano de Kondo e de Anderson, expressão seguinte para o deslocamento de fase é válida (32, 33),

$$\delta_{S=1/2}(\omega) = \frac{\pi}{2} - \tan^{-1} \left(\frac{\omega}{T_K} \right). \quad (2.52)$$

Podemos observar que este deslocamento de fase vai gerar uma ressonância no nível de Fermi com uma largura dada por T_K , e aquele dado por, $\eta_{\sigma}(\varepsilon_F) = \pi n_{d,\sigma}$, também gera a mesma ressonância. Embora os deslocamentos de fase desta seção e da seção anterior sejam bem parecidos, existe uma grande diferença entre eles. O deslocamento de fase da seção anterior não levou em conta a correlação coulombiana, o que levou ao desenvolvimento de uma ressonância centrada em E_f , a energia do nível localizado. No caso desta seção, o deslocamento de fase que foi obtido por meio de $\eta_{\sigma}(\varepsilon_F) = \pi n_{d,\sigma}$, gera uma ressonância no nível de Fermi, ε_F , que é conhecida como a ressonância de Kondo e Abrikosov-Suhl e é uma das principais assinaturas do efeito Kondo.

A seguir vamos calcular uma relação entre as ocupações e a densidade espectral, a regra da soma de Friedel, que vai ser fundamental no desenvolvimento deste trabalho. Podemos escrever a densidade espectral da seguinte forma,

$$\rho_{f,\sigma}(\omega) = \frac{(\Delta + \Sigma_{\sigma}^I(\omega))/\pi}{(\omega - E_{f,\sigma} - \Sigma_{\sigma}^R(\omega))^2 + (\Delta + \Sigma_{\sigma}^I(\omega))^2}, \quad (2.53)$$

onde o valor exato da densidade espectral na energia de Fermi pode-se obter com a ajuda do resultado (ii) e da definição da função trigonométrica seno como, $\rho_{d,\sigma}(\varepsilon_F) = \frac{1}{\pi\Delta} \sin^2(\theta)$, onde θ é igual a, $\tan^{-1} \left[\frac{\Delta}{E_{f,\sigma} - \varepsilon_F + \Sigma_{\sigma}^R(\varepsilon_F)} \right]$. Desenvolvendo os cálculos e con-

hecendo as propriedades do \arctan obtem-se o seguinte resultado final,

$$\rho_{f,\sigma}(\varepsilon_F) = \frac{1}{\pi\Delta} \sin^2(\pi n_{f,\sigma}). \quad (2.54)$$

Este resultado é conhecido como a regra da soma de Friedel e ele é fundamental neste trabalho porque ele terá que ser satisfeito pelas soluções obtidas com o método atômico. Até agora a influência do campo magnético não foi levada em conta, mas ele tem uma importância na física do sistema, e ele precisa ser incorporado na regra da soma. No caso do hamiltoniano de Kondo, Costi (34) propôs a seguinte regra da soma generalizada,

$$\rho_{f,\sigma}(\varepsilon_F) = \frac{1}{\pi\Delta} \sin^2 \frac{\pi}{2} (1 - 2\sigma M) \quad (2.55)$$

onde M é a magnetização, e ela possui a seguinte expressão segundo o Ansatz de Bethe,

$$2M = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{k!} (k + 1/2)^{k-1/2} e^{-(k+1/2)} \left(\sqrt{\frac{e}{2\pi T_0}} B \right)^{2k+1}. \quad (2.56)$$

Esta equação reflete a influência do termo Zeeman no hamiltoniano através do campo B . A validade dessa expressão para a magnetização é para campos magnéticos menores que $(2\pi B/e)^{1/2} T_0$, onde T_0 é um tipo de temperatura Kondo.

A regra da soma generalizada no caso do hamiltoniano de Anderson tem que ser expressa em função das ocupações dos elétrons localizados, como foi visto na equação 2.54. No caso do Hamiltoniano de Kondo essas ocupações não aparecem porque este hamiltoniano não tem flutuações de carga. Assim, a regra de soma de Friedel para o modelo de Anderson vem dada por

$$\rho_{f,\sigma}(\varepsilon_F) = \frac{1}{\pi\Delta} \sin^2 \pi n_{f,\sigma} (1 - \sigma M), \quad (2.57)$$

onde no caso do método atômico a magnetização é igual a diferença entre as ocupações com spin para cima e para baixo, $M = |n_{\uparrow} - n_{\downarrow}|$, onde $n_{\sigma} = \int_{-\infty}^{\mu} n_F(\omega) \rho_{\sigma}(\omega) d\omega$, com $n_F(\omega)$ sendo a função distribuição de Fermi, e $\rho_{\sigma}(\omega)$ a densidade de estados dos elétrons localizados

3 Método atômico

3.1 O método atômico para a impureza de Anderson

Conforme já discutimos na seção 2.5, o PAM no limite de repulsão Coulombiana infinita ($U \rightarrow \infty$) é descrito pelo hamiltoniano

$$H = \sum_{\vec{k}, \sigma} E_{\vec{k}\sigma} c_{\vec{k}, \sigma}^{\dagger} c_{\vec{k}, \sigma} + \sum_{i\sigma} E_{f, i\sigma} X_{i, \sigma\sigma} + V \sum_{i\vec{k}\sigma} \left(X_{i, 0\sigma}^{\dagger} c_{\vec{k}, \sigma} + c_{\vec{k}, \sigma}^{\dagger} X_{i, 0\sigma} \right), \quad (3.1)$$

onde o primeiro termo representa os elétrons de condução (c -elétrons), o segundo descreve os sítios da rede caracterizados pelos níveis localizados i com energia $E_{f, \sigma}$ (a letra f representa o nível localizado) e o último termo corresponde a interação entre os elétrons c e os elétrons localizados em cada sítio da rede, e que se conectam através de uma constante de hibridização V , aqui suposta constante por simplicidade. Foram usados os operadores de Hubbard (26, 35) para eliminar o estado de dupla ocupação $|f, 2\rangle$, do estado local da impureza, e que satisfaz a seguinte relação

$$X_{f, 00} + X_{f, \sigma\sigma} + X_{f, \bar{\sigma}\bar{\sigma}} = I, \quad (3.2)$$

onde $\bar{\sigma} = -\sigma$ e os três $X_{f, aa}$ são os projetores nos estados $|f, a\rangle$. os números de ocupação na impureza $n_{f, a} = \langle X_{f, aa} \rangle$ precisam, necessariamente, satisfazer a relação de completudeza

$$n_{f, 0} + n_{f, \sigma} + n_{f, \bar{\sigma}} = 1 \quad (3.3)$$

onde

$$n_{f, \sigma} = -\frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega n_F(\omega) \text{Im} G_{ff, \sigma}(\omega). \quad (3.4)$$

e

$$n_{f,0} = -\frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega (1 - n_F(\omega)) \text{Im} G_{ff,\sigma}(\omega). \quad (3.5)$$

onde n_F é a função distribuição de Fermi-Dirac.

Para obter a GF exata dos elétrons f ($G_{ff,\sigma}(\mathbf{j}_i, z)$) para o modelo da impureza de Anderson no sítio \mathbf{j}_i , podemos proceder de forma similar à usada por Franco et. al.(28), dentro da CHA, mas considerando todos os possíveis cumulantes da expansão, como foi feito por Foglio e Figueira (26) para a rede de Anderson. Com a técnica dos diagramas de Feynmann, podemos rearranjar todos os diagramas que contribuem para a função de Green $G_{ff,\sigma}(\mathbf{j}_i, z)$ definindo um cumulante efetivo $M_{2,\sigma}^{eff}(\mathbf{j}_i, z)$, que é dado por todos os diagramas $G_{ff,\sigma}(\mathbf{j}_i, z)$ que não podem ser separados por um “corte” sobre uma linha simples (usualmente chamado de “diagramas irreduzíveis”). Vamos considerar que a impureza esteja na origem, podemos assim retirar o termo \mathbf{j}_i de todas as quantidades. A função de Green exata $G_{ff,\sigma}(z)$ é obtida quando substituímos o cumulante de ordem zero, obtido quando $V = 0$ no Hamiltoniano de Anderson Eq. (3.1) ($M_{2,\sigma}^0(z) = -D_{\sigma}^0/(z - \varepsilon_f)$) pelo cumulante efetivo $M_{2,\sigma}^{eff}(z)$ em todos os vértices de elétrons f da cadeia de diagramas (26). Assim, a função de Green exata para os elétrons f pode ser escrita como

$$G_{ff,\sigma}(\mathbf{k}, z) = \frac{M_{2,\sigma}^{eff}(z)}{1 - M_{2,\sigma}^{eff}(z) |V|^2 \sum_{\mathbf{k}} G_{c,\sigma}^o(\mathbf{k}, z)}, \quad (3.6)$$

onde

$$G_{c,\sigma}^o(\mathbf{k}, z) = -1/(z - \varepsilon(\mathbf{k})). \quad (3.7)$$

A solução da função de Green atômica exata será obtida na seção 3.2 e tem a mesma forma da Eq.(3.6).

$$G_{ff,\sigma}^{at}(z) = \frac{M_{2,\sigma}^{at}(z)}{1 - M_{2,\sigma}^{at}(z) |V|^2 G_{c,\sigma}^o(z)}. \quad (3.8)$$

Onde $M_{2,\sigma}^{at}(z)$ é o cumulante atômico exato. Dessa equação, obtemos uma expressão explícita para $M_{2,\sigma}^{at}(z)$ em termos de $G_{ff,\sigma}^{at}(z)$

$$M_{2,\sigma}^{at}(z) = \frac{G_{ff,\sigma}^{at}(z)}{1 + G_{ff,\sigma}^{at}(z) |V|^2 G_{c,\sigma}^o(z)}. \quad (3.9)$$

Porém para diminuir a contribuição dos elétrons de condução, cujo efeito foi superestimado quando colapsamos toda a banda num único nível de energia E_q , trocaremos V^2 por

Δ^2 , onde $\Delta = \pi V^2/2D$, que é da ordem da largura do pico de Kondo. A aproximação atômica consiste em substituir $M_{2,\sigma}^{eff}(z)$ na Eq. (3.6) pelo valor aproximado de $M_{2,\sigma}^{at}(z)$ dado pela Eq. (3.9) e com $V^2 \rightarrow \Delta^2$. Como $M_{2,\sigma}^{at}(z)$ é independente de \mathbf{k} podemos facilmente obter a função de Green local para a impureza de Anderson numa banda quadrada de largura $2D$

$$G_{ff,\sigma}^{imp}(z) = \frac{M_{2,\sigma}^{at}(z)}{1 + M_{2,\sigma}^{at}(z) \frac{|V|^2}{2D} \ln \left(\frac{z+D+\mu}{z-D+\mu} \right)}, \quad (3.10)$$

e da mesma forma, calculamos as funções de Green para os elétrons de condução e a função de Green cruzada.

$$G_{cc,\sigma}^{imp}(z) = \frac{-1}{2D} \ln \left(\frac{z+D+\mu}{z-D+\mu} \right) - \frac{V^2}{D^2 - z^2} G_{ff,\sigma}^{imp}(z), \quad (3.11)$$

e

$$G_{fc,\sigma}^{imp}(z) = \frac{V}{2D} \ln \left(\frac{z+D+\mu}{z-D+\mu} \right) G_{ff,\sigma}^{imp}(z). \quad (3.12)$$

A diferença entre a GF exata e a aproximada é que diferentes energias ε_q aparecem nos elétrons de condução dos propagadores efetivos $M_{2,\sigma}^{eff}(z)$, enquanto que essas energias são todas iguais à ε_q no $M_{2,\sigma}^{at}(z)$ através da Eq. 3.7, e que para a solução atômica assume a forma:

$$G_{c,\sigma}^o(z) = -1/(z - \varepsilon_{o\sigma}), \quad (3.13)$$

onde com o campo magnético aplicado, haverá dois valores de $\varepsilon_{o\sigma}$, um para cada canal de spin. No caso sem campo magnético só haverá um valor de ε_o porque através dele será definido um mesmo cumulante atômico tanto para $G_{ff,\uparrow}^{imp}(z)$ quanto para $G_{ff,\downarrow}^{imp}(z)$. Porém quando $\vec{B} \neq 0$ precisa-se de dois valores de $\varepsilon_{o\sigma}$ porque neste caso as GF's serão diferentes para cada grau de liberdade de spin. A diferença entre as GF's gerará uma magnetização que aparecerá logo na regra de soma generalizada de Friedel. Apesar de $M_{2,\sigma}^{at}(z)$ se constituir somente em uma aproximação para a função de Green exata, ela contém todos os diagramas de cumulantes que estão presentes na solução exata. Por isso devemos esperar que as GF's Eqs. (3.10-3.12) tenham um caráter bastante realista. Devemos ainda decidir que valor de $\varepsilon_{o\sigma}$, que aparece na Eq. 3.7 devemos considerar. Como a região mais importante dos elétrons de condução é o potencial químico μ , iremos efetuar um cálculo variacional para o $\varepsilon_{o\sigma}$ de tal modo que essa quantidade possa variar em

torno do μ de tal forma que a regra de soma de Friedel generalizada 2.57 seja satisfeita

$$\rho_{f,\sigma}(\varepsilon_F) = \frac{1}{\pi\Delta} \sin^2 \pi n_{f,\sigma} (1 - \sigma M), \quad (3.14)$$

onde no caso do método atômico a magnetização é igual a diferença entre as ocupações com spin para cima e para baixo, $M = |n_\uparrow - n_\downarrow|$, onde $n_\sigma = \int_{-\infty}^{\mu} n_F(\omega) \rho_\sigma(\omega) d\omega$, com $n_F(\omega)$ sendo a função distribuição de Fermi, e $\rho_\sigma(\omega)$ a densidade de estados dos elétrons localizados. Ou seja, o aparecimento da magnetização no argumento da Eq. 3.14 faz com que a solução do problema se torne autoconsistente nos números de ocupação.

Assim, do ponto de vista numérico, quando o campo magnético esta presente o problema se complica, pois teremos que resolver um sistema não linear de duas equações acopladas pelos números de ocupação. O cálculo numérico é feito da seguinte forma: de acordo com a Eq. 3.13, escolhemos um valor para cada um dos dois valores de $\varepsilon_{o\sigma}$ em torno do potencial químico, geralmente negativos, para se obter a solução de Kondo. Com esses valores calculamos de acordo com o conjunto de Eqs. 3.8-3.10, as GF atômicas, os cumulantes atômicos e a GF da impureza para cada canal de spin. Usando a GF da impureza 3.10 calculamos as densidades de estados no potencial químico e os números de ocupação $n_{f,\sigma}$, usando a Eq. 3.4, caso os dois lados da Eq. 3.14 para cada canal de spin não sejam iguais, escolhemos um novo conjunto de valores de $\varepsilon_{o\sigma}$ e o processo continua até que os dois lados da regra de soma de Friedel se tornem iguais para cada um dos canais de spin. Podem ocorrer mais de um valor de $\varepsilon_{o\sigma}$ que satisfaça a regra de soma de Friedel, porém mostramos no trabalho original do método (37), que quando isso ocorre o $\varepsilon_{o\sigma}$ mais próximo do $\mu = 0$ é aquele que tem a menor energia livre e portanto é o que irá corresponder a solução do problema.

Agora podemos calcular as GF's para o PAM. Aqui deve ficar bem claro que para aplicar o método atômico ao PAM é necessário antes resolver o problema da impureza, para que possam ser calculados os cumulantes atômicos M_{at} consistentes com a satisfação da regra de soma de Friedel para o problema da impureza. Uma vez que estes cumulantes atômicos são conhecidos podemos usa-los para o cálculo das GF's do PAM.

3.2 Solução Atômica

Esta seção será dedicada, em sua totalidade, à solução atômica do modelo de Anderson. Nas duas seções anteriores deste capítulo foram calculadas expressões gerais

das GF's da rede e da impureza em função da solução atômica. Logo para completar o método, calcularemos a GF do sistema atômico a partir do Hamiltoniano do PAM 3.1, no limite quando o "hopping" entre os sítios da rede é desprezível. Nesse limite, todos os sítios da rede se desconectam entre si e tornam-se sítios isolados, então podemos escrever o Hamiltoniano para um desses sítios como sendo o Hamiltoniano de Anderson atômico

$$H = \sum_{\sigma} \varepsilon_q c_{q,\sigma}^{\dagger} c_{q,\sigma} + \sum_{\sigma} E_{f,\sigma} X_{\sigma,\sigma} + V \sum_{\sigma} (X_{0\sigma}^{\dagger} c_{q\sigma} + c_{q\sigma}^{\dagger} X_{0,\sigma}). \quad (3.15)$$

neste hamiltoniano, o somatório em k foi reduzido a um único termo que chamamos de q .

Os cálculos dessa seção serão feitos em presença de um campo magnético externo \vec{B} expresso pelo Hamiltoniano Zeeman expresso pela Eq. 2.20

$$H_Z = \mu_B g / 2\hbar \vec{S} \cdot \vec{B}, \quad (3.16)$$

onde o único efeito da inclusão desse termo ao Hamiltoniano 3.1 é a renormalização do nível localizado que passa a $E_{f,\sigma} = E_f + \sigma \mu_B g B / 2\hbar$. Para calcular os autoestados e as autoenergias do hamiltoniano 3.15, o espaço de Hilbert será construído a partir do produto tensorial dos espaços \mathcal{H}_1 e \mathcal{H}_2 , que são os espaços para os elétrons localizados e de condução respectivamente. A base para o espaço \mathcal{H}_1 está composta pelos estados localizados, $|0\rangle, |\frac{1}{2}\rangle, |-\frac{1}{2}\rangle$, e para a base do espaço \mathcal{H}_2 pelos estados dos elétrons livres $|0\rangle, |\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle, |\uparrow\downarrow\rangle$. Devemos observar que o estado de dupla ocupação não aparece na base do espaço \mathcal{H}_1 , isto acontece porque estamos estudando o limite de U infinito, onde o estado de dupla ocupação foi projetado fora do espaço de Hilbert pela ação dos operadores de Hubbard, para o qual podemos escrever

$$X_{\sigma;0}|0\rangle = |\sigma\rangle \quad (3.17)$$

$$X_{0;\sigma}|\sigma\rangle = |0\rangle, \quad (3.18)$$

onde σ pode assumir os valores de $\pm 1/2$. Do resultado anterior é possível interpretar a ação do operador de Hubbard pq como uma transformação do estado $|r\rangle$ ao $|p\rangle$, somente se $q = r$.

A dimensão do espaço de Hilbert para o método atômico da impureza de Anderson é 12, e seus vetores base como já foi dito acima, são gerados pelo produto tensorial dos

vetores base para os elétrons localizados e de condução, por exemplo $|1/2\rangle \otimes |\downarrow\rangle = |1/2, \downarrow\rangle$. A representação em matrizes do hamiltoniano atômico na base dada acima é expressa por uma matriz 12×12 ,

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & [A] & 0 & 0 \\ 0 & 0 & [B] & 0 \\ 0 & 0 & 0 & [C] \end{pmatrix}, \quad (3.19)$$

onde os zeros na coluna superior são só números e as entradas [A], [B] e [C] são as seguintes submatrizes respectivamente,

$$\begin{array}{c} |\uparrow, 0\rangle \quad |0, \frac{1}{2}\rangle \quad |\downarrow, 0\rangle \quad |0, -\frac{1}{2}\rangle \\ \begin{array}{l} \langle 0, \uparrow | \\ \langle \frac{1}{2}, 0 | \\ \langle 0, \downarrow | \\ \langle -\frac{1}{2}, 0 | \end{array} \end{array} \begin{pmatrix} \xi_{\uparrow} & V & 0 & 0 \\ V & E_{1/2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \xi_{\downarrow} & V \\ 0 & 0 & V & E_{-1/2} \end{pmatrix} \quad (3.20)$$

$$\begin{array}{c} |\uparrow, \frac{1}{2}\rangle \quad |\downarrow, -\frac{1}{2}\rangle \quad |\uparrow\downarrow, 0\rangle \quad |\downarrow, \frac{1}{2}\rangle \quad |\uparrow, -\frac{1}{2}\rangle \\ \begin{array}{l} \langle \frac{1}{2}, \uparrow | \\ \langle -\frac{1}{2}, \downarrow | \\ \langle 0, \uparrow\downarrow | \\ \langle \frac{1}{2}, \downarrow | \\ \langle -\frac{1}{2}, \uparrow | \end{array} \end{array} \begin{pmatrix} E_{1/2} + \xi_{\uparrow} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & E_{-1/2} + \xi_{\downarrow} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \xi_{\downarrow} + \xi_{\uparrow} & V & -V \\ 0 & 0 & V & E_{1/2} + \xi_{\downarrow} & 0 \\ 0 & 0 & -V & 0 & E_{-1/2} + \xi_{\uparrow} \end{pmatrix} \quad (3.21)$$

$$\begin{array}{c} |\uparrow\downarrow, \frac{1}{2}\rangle \quad |\uparrow\downarrow, -\frac{1}{2}\rangle \\ \begin{array}{l} \langle \frac{1}{2}, \uparrow\downarrow | \\ \langle -\frac{1}{2}, \uparrow\downarrow | \end{array} \end{array} \begin{pmatrix} E_{1/2} + \xi_{\downarrow} + \xi_{\uparrow} & 0 \\ 0 & E_{-1/2} + \xi_{\downarrow} + \xi_{\uparrow} \end{pmatrix}. \quad (3.22)$$

A tarefa principal aqui é encontrar os autovalores e os autoestados do hamiltoniano atômico. O trabalho de diagonalizar essa matriz 12×12 se simplifica devido as simetrias de conservação da componente S_z momento angular e do \vec{S}^2 . E como consequência dessas conservações, o hamiltoniano atômico possui uma estrutura diagonal por blocos, tal como

indicado nas matrizes acima. A diagonalização exata será iniciada pela submatriz $[C]$. Ela é uma submatriz diagonal de dimensão 2×2 , com autovalores dados pelos seus elementos diagonais, e autoestados $|\uparrow\downarrow, 1/2\rangle, |\uparrow\downarrow, -1/2\rangle$. A próxima submatriz a ser diagonalizada é $[A]$, ela também possui uma estrutura de blocos diagonais, e além disso seus blocos são similares, a diferença estando só nos seus elementos diagonais. Logo os resultados obtidos para a submatriz $[C]$ também são válidos aqui. Os autovalores para uma das submatrizes 2×2 da submatrix maior $[A]$, são obtidos a partir da equação: $\text{Det}(H^1 - \lambda I) = 0$, onde H^1 é dado por

$$H^1 = \begin{pmatrix} \xi_{\uparrow} & V \\ V & E_{1/2} \end{pmatrix}, \quad (3.23)$$

e os autovalores são

$$\lambda_{\pm} = \frac{\xi_{\uparrow} + E_{1/2} \pm \sqrt{(\xi_{\uparrow} - E_{1/2})^2 + 4V^2}}{2}. \quad (3.24)$$

Para tornar mais clara a escrita dos resultados anteriores e dos próximos cálculos, será útil lembrar a seguinte definição $\Delta = \sqrt{(\xi_{\uparrow} - E_{1/2})^2 + 4V^2}$. Para obter os autoestados da matriz H^1 é preciso encontrar a solução da equação linear $H^1 \vec{V} = \lambda \vec{V}$, onde as componentes do vetor \vec{V} são a e b . Da equação linear anterior, obtemos as seguintes relações, $\frac{a^+}{b^+} = \frac{\Delta - E_{1/2} + \xi_{\uparrow}}{2V}$ e $\frac{a^-}{b^-} = -\frac{\Delta + E_{1/2} - \xi_{\uparrow}}{2V}$. O super-índice \pm distingue entre as componentes a e b dos vetores V^{\pm} , que correspondem aos autovalores λ^{\pm} . Outra definição útil é a seguinte: $\tan \theta^+ = \frac{b^+}{a^+}$, porque com esta serão escritos os autovetores da matriz H^1 como,

$$\begin{aligned} |V^+\rangle &= \cos \theta^+ |\uparrow, 0\rangle + \sin \theta^+ |0, \frac{1}{2}\rangle \\ |V^-\rangle &= \sin \theta^+ |\uparrow, 0\rangle - \cos \theta^+ |0, \frac{1}{2}\rangle. \end{aligned} \quad (3.25)$$

Como já foi dito acima, não é preciso efetuar novos cálculos para o segundo bloco da submatriz $[A]$, isto porque eles serão obtidos a partir dos resultados anteriores. Basta substituir ξ_{\uparrow} por ξ_{\downarrow} , e $E_{1/2}$ por $E_{-1/2}$. Para os autovalores obtemos o seguinte resultado

$$\lambda_{\pm} = \frac{\xi_{\downarrow} + E_{-1/2} \pm \Delta'}{2}, \quad (3.26)$$

onde $\Delta' = \sqrt{(\xi_{\downarrow} - E_{-1/2})^2 + 4V^2}$, e podemos escrever para os autovetores

$$\begin{aligned} |\vec{V}^+\rangle &= \cos \alpha^+ |\downarrow, 0\rangle + \sin \alpha^+ |0, \frac{1}{2}\rangle \\ |\vec{V}^-\rangle &= \sin \alpha^+ |\downarrow, 0\rangle - \cos \alpha^+ |0, -\frac{1}{2}\rangle, \end{aligned} \quad (3.27)$$

onde $\tan \alpha^+ = \frac{2V}{\Delta' + \xi_{\downarrow} - E_{-1/2}}$. Com a submatriz $[A]$ completamente diagonalizada o próximo passo é calcular as autoenergias e os autoestados da submatriz de dimensão 3x3 em $[B]$. Nesse caso, obtemos a partir da equação secular de $[B]$ uma equação algébrica de terceiro grau, que poderá ser solucionada analiticamente pela fórmula de Cardano ou também numericamente. Essa equação se origina da seguinte expressão,

$$(\xi_{\downarrow} + \xi_{\uparrow} - \lambda)(E_{1/2} + \xi_{\downarrow} - \lambda)(E_{-1/2} + \xi_{\uparrow} - \lambda) - V^2(\xi_{\downarrow} + \xi_{\uparrow} + E_{1/2} + E_{-1/2} - 2\lambda) = 0. \quad (3.28)$$

Como temos um campo magnético aplicado somente na impureza, e por tanto $\xi_{\downarrow} = \xi_{\uparrow} = \xi_q$, $E_{1/2} = E_f + \delta$, e $E_{-1/2} = E_f - \delta$, onde $\delta = \mu_B g B / 2\hbar$, teremos que resolver a seguinte equação de terceiro grau

$$(2\xi_q - \lambda)[(E_f + \xi_q - \lambda)^2 - \delta^2] - 2V^2(E_f + \xi_q - \lambda) = 0, \quad (3.29)$$

onde as soluções serão obtidas numericamente e as chamaremos $\lambda_{0,1,2}$. Então podemos escrever os autovetores de $[B]$ em função dos autovalores $\lambda_{0,1,2}$ da seguinte maneira

$$\begin{aligned} |\vec{V}_0\rangle &= \sin \phi_0 \sin \Lambda_0 |\downarrow, \frac{1}{2}\rangle + \sin \phi_0 \cos \Lambda_0 |\uparrow, -\frac{1}{2}\rangle + \cos \phi_0 |\uparrow\downarrow, 0\rangle, \\ |\vec{V}_1\rangle &= \sin \phi_1 \sin \Lambda_1 |\downarrow, \frac{1}{2}\rangle + \sin \phi_1 \cos \Lambda_1 |\uparrow, -\frac{1}{2}\rangle + \cos \phi_1 |\uparrow\downarrow, 0\rangle, \\ |\vec{V}_2\rangle &= \sin \phi_2 \sin \Lambda_2 |\downarrow, \frac{1}{2}\rangle + \sin \phi_2 \cos \Lambda_2 |\uparrow, -\frac{1}{2}\rangle + \cos \phi_2 |\uparrow\downarrow, 0\rangle, \end{aligned} \quad (3.30)$$

onde para simplificar a notação, vamos definir as seguintes variáveis $w_{0,1,2}$, por meio da equação, $w_{0,1,2} = E_f + \xi_q - \lambda_{0,1,2}$. Com isto, a partir das equações abaixo podemos escrever os seis diferentes ângulos na Eq. 3.30 em função dos parâmetros do hamiltoniano,

$$\tan \Lambda_{0,1,2} = \frac{(w_{0,1,2} - \delta)}{(w_{0,1,2} + \delta)}, \quad (3.31)$$

e

$$\tan \phi_{0,1,2} = V \frac{\sqrt{2[w_{0,1,2}^2 + \delta^2]}}{[w_{0,1,2}^2 - \delta^2]}. \quad (3.32)$$

n	r	S_z	$E_{n,r}$	Autoestados
0	1	0	0	$ 0,0\rangle$
1	2	$-\frac{1}{2}$	$\frac{\xi_q + E_f - \delta - \Delta'}{2}$	$\sin \alpha \downarrow, 0\rangle - \cos \alpha 0, \frac{-1}{2}\rangle$
1	3	$\frac{1}{2}$	$\frac{\xi_q + E_f + \delta - \Delta}{2}$	$\sin \theta \uparrow, 0\rangle - \cos \theta 0, \frac{1}{2}\rangle$
1	4	$-\frac{1}{2}$	$\frac{\xi_q + E_f - \delta + \Delta'}{2}$	$\cos \alpha \downarrow, 0\rangle + \sin \alpha 0, \frac{-1}{2}\rangle$
1	5	$\frac{1}{2}$	$\frac{\xi_q + E_f + \delta + \Delta}{2}$	$\cos \theta \uparrow, 0\rangle + \sin \theta 0, \frac{1}{2}\rangle$
2	6	-1	$E_f + \xi_q - \delta$	$ \downarrow, \frac{-1}{2}\rangle$
2	7	0	λ_1	$a^1 \uparrow\downarrow, 0\rangle + b^1 \downarrow, \frac{1}{2}\rangle + c^1 \uparrow, \frac{-1}{2}\rangle$
2	8	1	$E_f + \xi_q + \delta$	$ \uparrow, \frac{1}{2}\rangle$
2	9	0	λ_0	$a^0 \uparrow\downarrow, 0\rangle + b^0 \downarrow, \frac{1}{2}\rangle + c^0 \uparrow, \frac{-1}{2}\rangle$
2	10	0	λ_2	$a^2 \uparrow\downarrow, 0\rangle + b^2 \downarrow, \frac{1}{2}\rangle + c^2 \uparrow, \frac{-1}{2}\rangle$
3	11	$-\frac{1}{2}$	$E_f + 2\xi_q - \delta$	$ \uparrow\downarrow, \frac{-1}{2}\rangle$
3	12	$\frac{1}{2}$	$E_f + 2\xi_q + \delta$	$ \uparrow\downarrow, \frac{1}{2}\rangle$

Tabela 3.1: Nesta tabela resumimos os principais resultados desta seção. O índice n distingue a carga dos estados, o índice r numera todos os possíveis estados, S_z é o valor da componente z do spin e E_n é a energia de cada um dos estados.

Com as expressões dadas acima para $E_{\pm 1/2}$ e $\xi_{\uparrow,\downarrow}$ os autovalores e autoestados da submatriz $[A]$ são modificadas de uma maneira muito simples. As expressões para Δ e Δ' se transformam em: $\Delta = \sqrt{(\xi_q - E_f - \delta)^2 + 4V^2}$, $\Delta' = \sqrt{(\xi_q - E_f + \delta)^2 + 4V^2}$. Os ângulos θ^+ e α^+ agora sem super-índices, se tornam: $\tan \theta = 2V/(\xi_q - E_f - \delta + \Delta)$ e $\tan \alpha = 2V/(\xi_q - E_f + \delta + \Delta')$. Para a submatriz $[C]$, e em geral para a matriz inteira que representa o hamiltoniano também teremos que levar em conta o valor dado para $E_{\pm 1/2}$. Na tabela 3.1 apresentamos um resumo dos resultados obtidos para o método atômico em presença do campo magnético aplicado.

Agora que já foram obtidos os autoestados e os autovalores do método atômico, a função de Green deste modelo será encontrada de acordo com a Eq. 2.23, onde os operadores fermiônicos f_σ agora se tornam os operadores Hubbard $X_{0,\sigma}$ no limite de $U \rightarrow \infty$, e os autoestados e autovalores do hamiltoniano completo são aqueles do hamiltoniano atômico, isto é,

$$G_\mu^{at}(\omega) = e^{\beta\Omega} \sum_n \sum_{j,j'} (e^{-\beta E_{n,j}} + e^{-\beta E_{n-1,j'}}) \times \frac{|\langle n-1, j' | X_\mu | nj \rangle|^2}{\omega - (E_{n,j} - E_{n-1,j'})}, \quad (3.33)$$

onde Ω é o potencial termodinâmico e os sub-índices n, j numeram os estados atômicos, com n sendo o número quântico de carga. O fato de que a GF seja expressa em função dos elementos diagonais da representação matricial de X_μ , $\langle n-1, j' | X_\mu | nj \rangle$, está associado com a natureza dos operadores de Hubbard, porque na interpretação dada anteriormente,

eles transformam um estado p no estado q , e no caso do operador $X_{0,\sigma}$ quando aplicado num estado ele reduz a carga do sistema. Logo para calcular a GF precisamos encontrar as representações matriciais dos operadores $X_{0,1/2}$ e $X_{0,-1/2}$ na base que diagonaliza o hamiltoniano atômico, ou seja os estados da tabela 3.1, onde neste caso os operadores de Hubbard não são diagonais. Assim por exemplo, para $X_{0,1/2}$ teremos a representação matricial,

$$\begin{pmatrix} 0 & [D] & 0 & 0 \\ \boxed{\begin{array}{c} \text{subespaço com} \\ \text{número de carga} \\ N = 1 \end{array}} & & [E] & 0 \\ & \boxed{\begin{array}{c} \text{subespaço com} \\ \text{número de carga} \\ N = 2 \end{array}} & & [F] \\ & & & \boxed{\begin{array}{c} \text{subespaço com} \\ \text{número de carga} \\ N = 3 \end{array}} \end{pmatrix},$$

onde as entradas [D], [E] e [F] são as seguintes submatrizes retangulares respectivamente,

$$\langle V_1 | \begin{pmatrix} |V_2\rangle & |V_3\rangle & |V_4\rangle & |V_5\rangle \\ 0 & -\cos\theta & 0 & \sin\theta \end{pmatrix},$$

$$\begin{matrix} \langle V_2 | \\ \langle V_3 | \\ \langle V_4 | \\ \langle V_5 | \end{matrix} \begin{pmatrix} |V_6\rangle & |V_7\rangle & |V_8\rangle & |V_9\rangle & |V_{10}\rangle \\ 0 & b_1 \sin\alpha & 0 & b_0 \sin\alpha & b_2 \sin\alpha \\ 0 & 0 & \sin\theta & 0 & 0 \\ 0 & b_1 \cos\alpha & 0 & b_0 \cos\alpha & b_2 \cos\alpha \\ 0 & 0 & \cos\theta & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \begin{matrix} \langle V_6 | \\ \langle V_7 | \\ \langle V_8 | \\ \langle V_9 | \\ \langle V_{10} | \end{matrix} \begin{pmatrix} |V_{11}\rangle & |V_{12}\rangle \\ 0 & 0 \\ 0 & a_1 \\ 0 & 0 \\ 0 & a_0 \\ 0 & a_2 \end{pmatrix}$$

e para $X_{0,-1/2}$ as submatrizes retangulares são

$$\langle V_1 | \begin{pmatrix} |V_2\rangle & |V_3\rangle & |V_4\rangle & |V_5\rangle \\ -\cos\alpha & 0 & \sin\alpha & 0 \end{pmatrix}$$

Polo	Residuo
E_3	$\cos^2 \theta (1 + e^{-\beta E_3} + e^{-\beta E_5} + e^{-\beta E_8})$
E_5	$\sin^2 \theta (1 + e^{-\beta E_3} + e^{-\beta E_5} + e^{-\beta E_8})$
$E_7 - E_2$	$b_1^2 \sin^2 \alpha (e^{-\beta E_7} + e^{-\beta E_2})$
$E_9 - E_2$	$b_0^2 \sin^2 \alpha (e^{-\beta E_9} + e^{-\beta E_2})$
$E_{10} - E_2$	$b_2^2 \sin^2 \alpha (e^{-\beta E_{10}} + e^{-\beta E_2})$
$E_7 - E_4$	$b_1^2 \cos^2 \alpha (e^{-\beta E_7} + e^{-\beta E_4})$
$E_9 - E_4$	$b_0^2 \cos^2 \alpha (e^{-\beta E_9} + e^{-\beta E_4})$
$E_{10} - E_4$	$b_2^2 \cos^2 \alpha (e^{-\beta E_{10}} + e^{-\beta E_4})$
$E_{12} - E_7$	$a_1^2 (e^{-\beta E_7} + e^{-\beta E_{12}})$
$E_{12} - E_9$	$a_0^2 (e^{-\beta E_9} + e^{-\beta E_{12}})$
$E_{12} - E_{10}$	$a_2^2 (e^{-\beta E_{10}} + e^{-\beta E_{12}})$

Tabela 3.2: Os pólos e os resíduos da função de Green atômica $G_{\uparrow}^{at}(\omega)$ com spin para cima são escritos a partir das energias do método atômico, já foram apresentadas na tabela 3.1 juntamente com os autoestados.

$$\begin{pmatrix} \langle V_2 | \\ \langle V_3 | \\ \langle V_4 | \\ \langle V_5 | \end{pmatrix} \begin{pmatrix} |V_6\rangle & |V_7\rangle & |V_8\rangle & |V_9\rangle & |V_{10}\rangle \\ \sin \alpha & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & c_1 \sin \theta & 0 & c_0 \sin \theta & c_2 \sin \theta \\ \cos \alpha & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & c_1 \cos \theta & 0 & c_0 \cos \theta & c_2 \cos \theta \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} \langle V_6 | \\ \langle V_7 | \\ \langle V_8 | \\ \langle V_9 | \\ \langle V_{10} | \end{pmatrix} \begin{pmatrix} |V_{11}\rangle & |V_{12}\rangle \\ 0 & 0 \\ a_1 & 0 \\ 0 & 0 \\ a_0 & 0 \\ a_2 & 0 \end{pmatrix}.$$

Logo depois de efetuar uma álgebra muito simples na expressão para a GF, encontramos que a GF atômica pode ser escrita como na Eq. 3.34, onde os pólos e os resíduos desta GF são listados nas tabelas 3.2 e 3.3 para as funções de Green atômicas com spin para cima e para baixo respectivamente

$$G_{\sigma}^{at}(\omega) = e^{\beta\Omega} \sum_{i=1}^{11} \frac{m_i}{\omega - u_i}. \quad (3.34)$$

Para ilustrar a compreensão das GF's atômicas encontradas anteriormente, apresentaremos um gráfico com os autovalores do hamiltoniano e as transições envolvidas para cada umas das GF's, veja a Fig. 3.1. Em cada coluna dos diagramas estão agrupados os estados com número de carga n . Por exemplo na terceira coluna de esquerda à direita aparecem os estados $|6\rangle$, $|7\rangle$, $|8\rangle$, $|9\rangle$ e $|10\rangle$ que possuem o número de carga 2 (veja a tabela 3.1). Também é possível observar que os pares de estados ($|2\rangle$, $|3\rangle$); ($|4\rangle$, $|5\rangle$) e ($|11\rangle$, $|12\rangle$) formam três dubletos, isto porque na tabela 3.1 a componente z do operador spin é $1/2$.

Polo	Resíduo
E_2	$\cos^2 \alpha (1 + e^{-\beta E_2} + e^{-\beta E_4} + e^{-\beta E_6})$
E_4	$\sin^2 \alpha (1 + e^{-\beta E_2} + e^{-\beta E_4} + e^{-\beta E_6})$
$E_7 - E_3$	$c_1^2 \sin^2 \theta (e^{-\beta E_7} + e^{-\beta E_3})$
$E_9 - E_3$	$c_0^2 \sin^2 \theta (e^{-\beta E_9} + e^{-\beta E_3})$
$E_{10} - E_3$	$c_2^2 \sin^2 \theta (e^{-\beta E_{10}} + e^{-\beta E_3})$
$E_7 - E_5$	$c_1^2 \cos^2 \theta (e^{-\beta E_7} + e^{-\beta E_5})$
$E_9 - E_5$	$c_0^2 \cos^2 \theta (e^{-\beta E_9} + e^{-\beta E_5})$
$E_{10} - E_5$	$c_2^2 \cos^2 \theta (e^{-\beta E_{10}} + e^{-\beta E_5})$
$E_{11} - E_7$	$a_1^2 (e^{-\beta E_7} + e^{-\beta E_{11}})$
$E_{11} - E_9$	$a_0^2 (e^{-\beta E_9} + e^{-\beta E_{11}})$
$E_{11} - E_{10}$	$a_2^2 (e^{-\beta E_{10}} + e^{-\beta E_{11}})$

Tabela 3.3: Pólos e resíduos da GF atômica $G_{\downarrow}^{at}(\omega)$ com spin para baixo, também escritos a partir dos autovalores do método atômico como na tabela anterior.

As linhas que ligam os diferentes autoestados representam os pólos das GF's atômicas. Por exemplo veja que o quinto pólo na tabela 3.2 é $E_{10} - E_2$, e ele é representado na figura 3.1 (a) por uma linha entre aqueles estados. Para os outros 10 pólos a representação é a mesma.

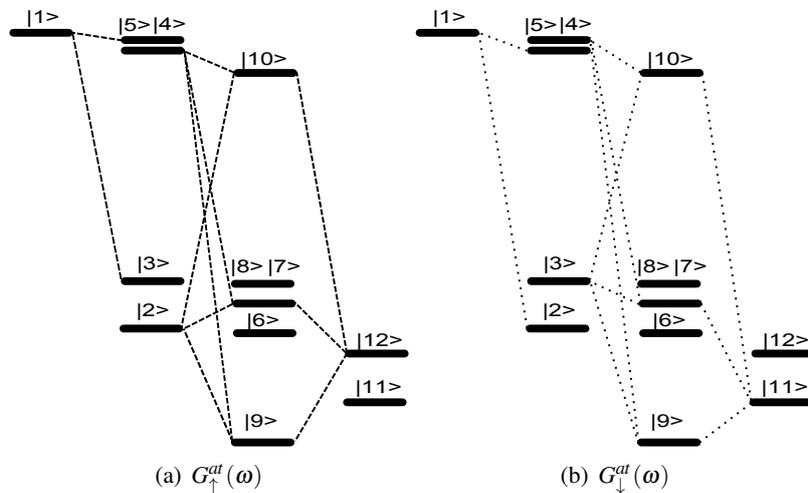


Figura 3.1: Diagrama de níveis do hamiltoniano atômico, junto com as transições envolvidas nas GF's atômicas (os pólos das GF's). Neste diagrama é possível perceber que os estados com número de carga n pertencem à mesma coluna, também pode ser visto que os estados $|1\rangle$, $|9\rangle$ e $|10\rangle$ são singletos, os estados $|6\rangle$, $|7\rangle$ e $|8\rangle$ formam um tripleto, e os outros 6 formam 3 dubletos.

4 *Resultados*

4.1 O modelo da impureza de Anderson

Nessa seção vamos estudar o efeito de um campo magnético externo sobre os níveis da impureza de Anderson. Na Fig. 4.1 apresentamos as densidades de estados dos elétrons localizados para cada grau de liberdade de spin em função da frequência ω . Esta densidade de estados, foi obtida a partir da GF não localizada, Eq. 3.10, calculada autoconsistentemente de tal modo que, a regra de soma de Friedel é satisfeita para os canais de spin “up” e “down”, respectivamente. Em todos os gráficos, o campo magnético é calculado empregando unidades de, $[\mu_B g B / \hbar]$. Na Fig. 4.1 o valor do campo magnético é $B = 0.9T_K$, onde T_K é a temperatura de Kondo que é definida segundo o método atômico, como a semi largura da ressonância de Kondo. Em todos os resultados apresentados neste trabalho o valor da hibridização no Hamiltoniano do SIAM (Eq. 2.14) é $V = 0.08$.

Para cada grau de liberdade de spin existem dois picos; um deles é uma banda ressonante centrada em torno de $E_f = -0.07$, e a outra localizada no potencial químico $\mu = 0$ (ressonância de Kondo ou de Abrikosov-Suhl). O principal efeito do campo magnético aplicado é o desdobramento do pico de Kondo em torno do potencial químico $\mu = 0$. Para um valor finito do campo B , o termo Zeeman quebra a degenerescência dos estados degenerados do hamiltoniano do SIAM como os dubletos, tripletos, etc. e as transições e autoenergias, neste caso serão diferentes para o sistema com $B = 0$. Por exemplo, na aproximação atômica Fig. 3.1, o estado singlete $|9\rangle$ é o estado com menor energia, e o primeiro estado excitado é o $|11\rangle$ que faz parte de um dubleto. Logo, para campos magnéticos fortes, ocorrerá uma competição pelo estado fundamental do hamiltoniano devido a separação Zeeman, e o pico de Kondo desaparecerá quando o estado singlete não for mais o estado fundamental do sistema.

Devemos indicar que todos os cálculos foram feitos considerando como unidade de

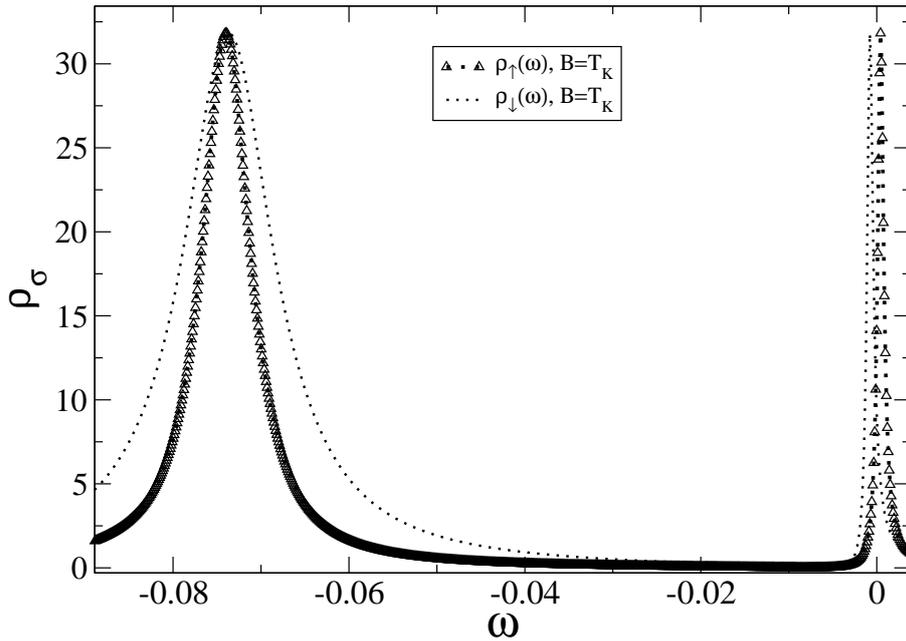


Figura 4.1: Densidade de estados para cada grau de liberdade de spin em função da frequência quando um campo magnético, $B = 0.9T_K$ é aplicado.

energia a semi largura da banda de condução, $D = 1.0$. Na Fig. 4.2 graficamos a densidade total de estados $\rho_{\uparrow} + \rho_{\downarrow}$, para cinco valores diferentes do campo magnético B , onde só mostraremos a região em torno do potencial químico $\mu = 0$. Para campos magnéticos muito baixos $B = 0.4T_K$, o pico de Kondo ainda existe mas para $B = 0.6T_K$ a altura do pico decresce e o pico de Kondo começa a ser dividido em dois novos picos. Para $B = 0.8T_K$ uma curva com dois picos já está bem formada e não existe mais a ressonância em $\mu = 0$. Para valores maiores do campo magnético \vec{B} , a separação continua e a estrutura de dois picos se mantém bem formada. Estes resultados são similares aos obtidos por Costi (34), usando o NRG.

Outro fenômeno interessante que foi observado nos gráficos da densidade de estados para campos magnéticos grandes foi o alargamento e o estreitamento da banda ressonante em E_f com spin para baixo e para cima, respectivamente (veja a Fig. 4.3). A interpretação deste fenômeno é que mais elétrons de condução ressoam com o nível discreto com spin para baixo, pelo fato dele ter a menor energia. Devemos observar que o efeito do termo Zeeman no hamiltoniano de Anderson é quebrar a degenerescência dos níveis discretos, gerando dois estados separados por uma energia proporcional a B . Então, o termo Zeeman é o responsável pela menor ressonância de elétrons de condução com o nível de maior

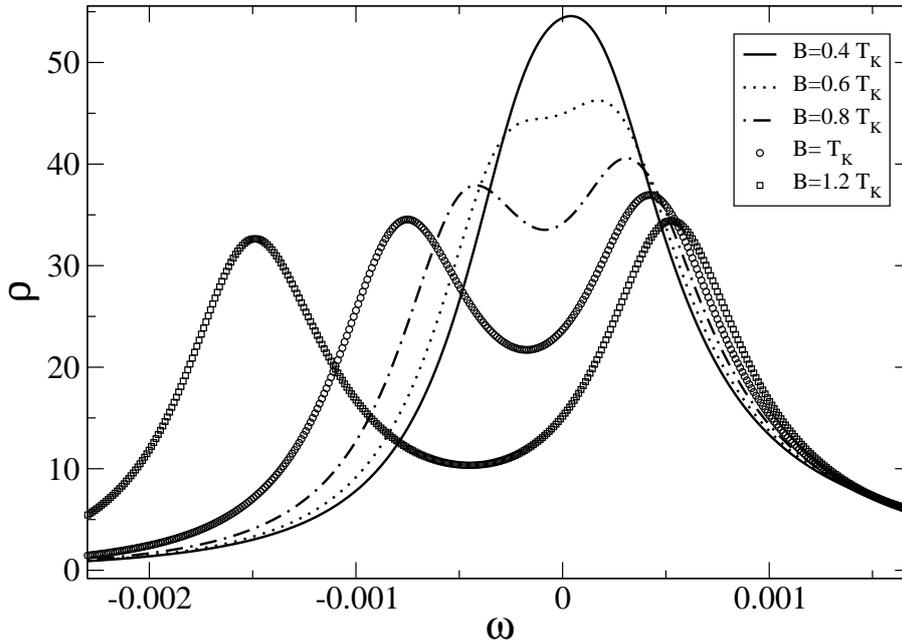


Figura 4.2: Densidade total de estados ($\rho_{\uparrow} + \rho_{\downarrow}$) para diferentes valores do campo magnético B , perto do potencial químico. O campo magnético foi expresso em unidades da temperatura de Kondo, obtida quando $B = 0$, e nesse caso $T_K = 0,00043$.

energia. Para melhorar a compreensão deste fenômeno, na próxima seção voltaremos a este caso calculando as ocupações e a magnetização.

4.2 O Ansatz de Bethe

Os resultados que serão apresentados nesta seção foram obtidos na segunda fase do trabalho. A motivação para obtê-los foi a existência de expressões analíticas obtidas com o ansatz de Bethe para a magnetização e o deslocamento de fase (32, 33).

A expressão para a magnetização segundo o Ansatz de Bethe é a seguinte,

$$2M = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{k!} (k + 1/2)^{k-1/2} e^{-(k+1/2)} \left(\sqrt{\frac{e}{2\pi T_0}} B \right)^{2k+1}, \quad (4.1)$$

onde esta equação reflete a influência do termo Zeeman no hamiltoniano através do campo magnético B . A validade dessa expressão para a magnetização é para campos magnéticos menores que $(2\pi B/e)^{1/2} T_0$, onde $T_0 = D e^{-\pi/c_{imp}}$ é a temperatura Kondo de um sistema de impurezas diluídas, com c_{imp} a concentração de impurezas e D a largura da banda do

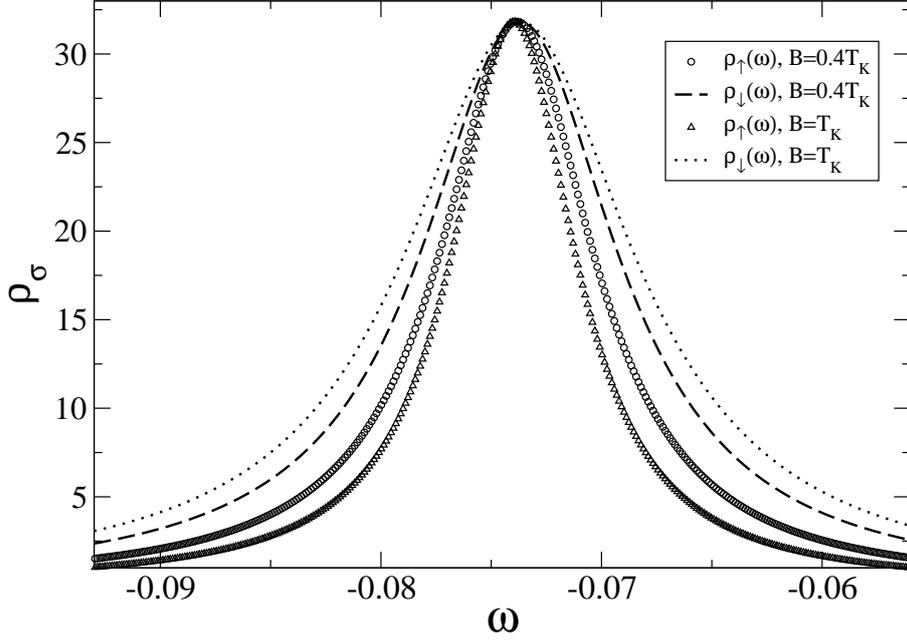


Figura 4.3: Banda ressonante em E_f , para cada grau de liberdade de spin. É possível verificar que quando o campo magnético é aplicado a densidade com spin para baixo se alarga, ao passo que a densidade com spin para cima se estreita.

metal. Outro resultado do ansatz de Bethe que vai ser testado neste trabalho é o deslocamento de fase que tem a seguinte expressão,

$$\delta_\sigma(B) = \frac{\pi}{2} \left\{ 1 - \sigma \frac{1}{\sqrt{\pi}} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{k!} (k+1/2)^{k-1/2} e^{-(k+1/2)} \left(\sqrt{\frac{e}{2\pi T_0}} B \right)^{2k+1} \right\}. \quad (4.2)$$

É importante dizer que a última fórmula para o deslocamento de fase, obtido segundo o ansatz de Bethe para o modelo de Kondo, não está expresso em função das ocupações. Porém, no caso do modelo de Anderson e a partir da regra da soma generalizada da equação 2.57, pode-se ver que o deslocamento de fase é igual a:

$$\delta_\sigma = \pi n_{f,\sigma} (1 - \sigma M), \quad (4.3)$$

isto porque as ocupações no modelo de Anderson não são iguais a $1/2$.

Embora os primeiros dados do desdobramento do pico de Kondo devido ao termo Zeeman já ratificavam a validade do método atômico como uma aproximação alternativa e eficiente, a comparação com o Ansatz de Bethe fornece uma nova oportunidade para testar os limites de validade do método. Iremos comparar resultados para o deslocamento

de fase e para a magnetização obtidos com método atômico com resultados similares obtidos com o ansatz de Bethe. A comparação com os resultados do ansatz de Bethe deve ser entendida com uma certa cautela, pois são modelos diferentes que estão sendo comparados, por um lado o modelo de Anderson no limite de correlação Coulombiana infinita (método atômico) e por outro o modelo de Kondo (ansatz de Bethe).

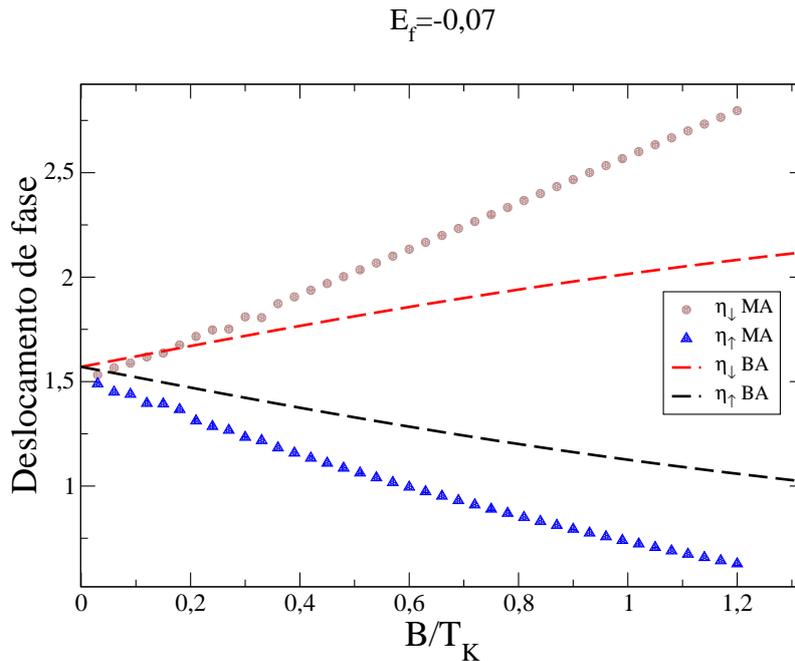


Figura 4.4: Deslocamento de fase em função de B/T_K , onde B é o campo magnético aplicado e T_K a temperatura de Kondo. Os pontos e os triângulos representam o deslocamento de fase do sistema com spin para cima e para baixo, segundo o método atômico. Os dados representados pelas linhas pontilhadas foram obtidos a partir do ansatz de Bethe. O valor da energia da impureza E_f , neste caso é igual a $-0,07$.

Nas Figs. 4.4 e 4.5 representamos os deslocamento de fase em função de B/T_K , onde B é o campo magnético aplicado e T_K é a temperatura de Kondo para $E_f = -0,07$ e $E_f = -0,10$ respectivamente. Apesar de ambas as curvas estarem no regime de Kondo, ainda existe flutuações de carga presentes no sistema e os resultados concordarão mais com o ansatz de Bethe à medida que essas flutuações de carga sejam suprimidas no regime de Kondo, o que ocorre na Fig. 4.6, onde o valor do nível da impureza E_f é igual a $-0,15$, e os resultados entre o método atômico e o ansatz de Bethe concordam muito bem para este valor. Isto ocorre, porque o hamiltoniano de Kondo segundo a transformação de Schrieffer Wolff (36), é o limite de baixas energias do hamiltoniano de Anderson. No

hamiltoniano Kondo não existem flutuações de carga e portanto, a soma das ocupações é igual a unidade. Este regime é obtido a partir do hamiltoniano de Anderson quando o nível da impureza está bem no interior da banda de condução, como por exemplo $E_f = -0,15$. Entretanto, no limite de Kondo extremo para $E_f < -0,15$, não esperamos que o método atômico apresente bons resultados, pois o método atômico não consegue reproduzir o comportamento exponencial correto da temperatura de Kondo nesse regime extremo, e consequentemente sua validade fica restrita ao regime de Kondo intermediário onde sua temperatura de Kondo se aproxima mais do resultado exato do ansatz de Bethe $T_K = De^{-\pi/c_{imp}}$, onde D é um cutoff no método e c_{imp} é a concentração de impurezas(para mais detalhes consulte a análise feita no trabalho original (37)).

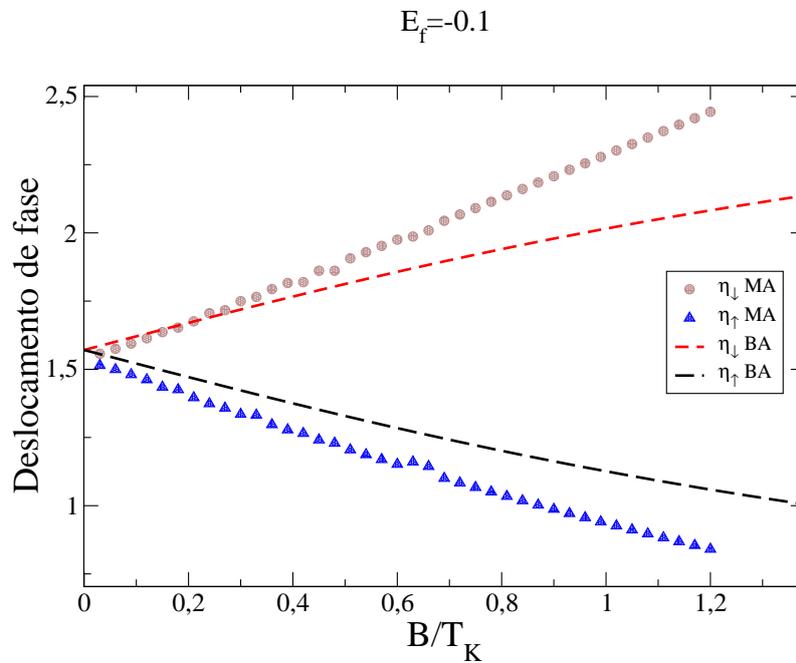


Figura 4.5: Deslocamento de fase em função de B/T_K , onde B é o campo magnético aplicado e T_K a temperatura de Kondo. Os pontos e os triângulos representam o deslocamento de fase do sistema com spin para cima e para baixo, segundo o método atômico. Os dados representados pelas linhas pontilhadas foram obtidos a partir do ansatz de Bethe. O valor da energia da impureza E_f , neste caso é igual a $-0,10$.

Agora será discutido a magnetização, também segundo os métodos mencionados acima. A equação 4.1 gera uma expressão para a magnetização segundo o ansatz de Bethe, mais uma vez em função de B/T_K . No caso do método atômico a magnetização é igual a diferença entre as ocupações com spin para cima e para baixo, $M = |n_{\uparrow} - n_{\downarrow}|$, onde

$n_\sigma = \int_{-\infty}^{\mu} n_F(\omega) \rho_\sigma(\omega) d\omega$, com $n_F(\omega)$ sendo a função distribuição de Fermi, e $\rho_\sigma(\omega)$ a densidade de estados dos elétrons localizados.

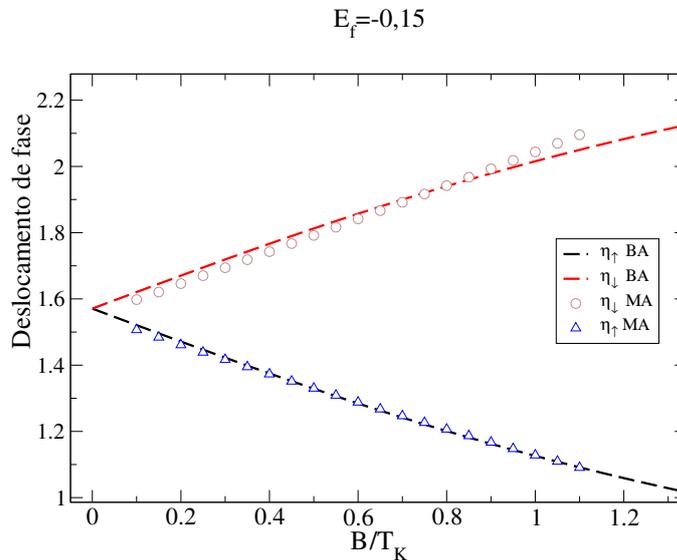


Figura 4.6: Deslocamento de fase em função de B/T_K , onde B é o campo magnético aplicado e T_K a temperatura de Kondo. Os pontos e os triângulos representam o deslocamento de fase do sistema com spin para cima e para baixo, segundo o método atômico. Os dados representados pelas linhas pontilhadas foram obtidos a partir do ansatz de Bethe. O valor da energia da impureza E_f , neste caso é igual a $-0,15$.

Na Fig. 4.7 comparamos os resultados da magnetização obtidos pelo método atômico e pelo ansatz de Bethe. Devemos observar que a medida que variamos a posição do nível localizado desde $E_f = -0,07$ até $E_f = -0,15$ as curvas se aproximam do resultado exato obtido com a ansatz de Bethe até concordarem em $E_f = -0,15$. Isto era de se esperar porque como foi mostrado com o deslocamento de fase na Fig. 4.6, para este valor do nível da impureza os dois métodos apresentam uma boa concordância. No entanto, para os valores de E_f menores que $-0,15$ há diferenças substanciais. Mas isso ocorre porque estamos comparando resultados de modelos diferentes. Para $E_f = -0,15$ o modelo de Anderson se encontra no regime Kondo onde as flutuações de carga são muito pequenas em relação as flutuações de spin, o que faz com o modelo de Anderson possa ser comparado com o de Kondo e os resultados obtidos são bastante bons. Para $E_f = -0,07$ e $E_f = -0,10$ as flutuações de carga se tornar relevantes e os dois modelos não podem ser comparados com a mesma eficiência. Para $E_f < -0,15$ as diferenças são novamente

apreciáveis, entretanto como já discutimos no parágrafo anterior o método atômico não é capaz de produzir resultados confiáveis nesse limite, uma vez que sua temperatura de Kondo não segue um comportamento exponencial.

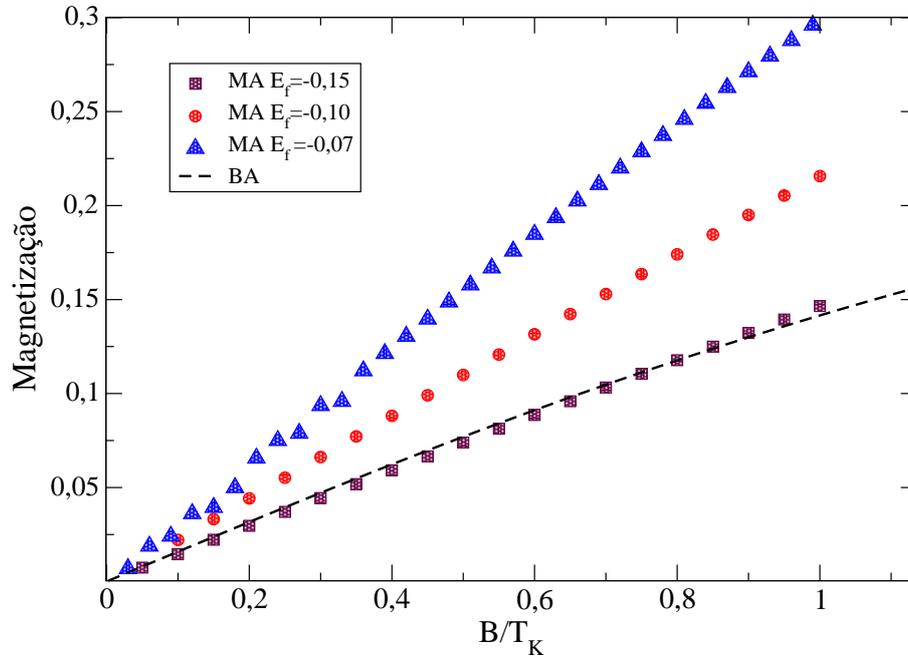


Figura 4.7: Magnetização em função de B/T_K segundo o método atômico e o ansatz de Bethe (BA).

Nos parágrafos anteriores discutimos o regime de valência intermediária sem nos aprofundarmos muito na sua física. Para melhorar a compreensão das idéias expostas anteriormente, discutiremos um pouco mais este regime. Como foi dito no parágrafo anterior as flutuações de carga neste caso, não são desprezíveis. Então para observar como essas flutuações se apresentam, vamos graficar a densidade de estados em função de E_f , desde de $E_f = 0.0$ (regime de valência intermediária) até $E_f = -0.10$ (regime Kondo). Na figura 4.8 apresentamos as densidades de estado do spin para cima e para baixo em função da frequência ω , para diferentes valores de E_f e do campo magnético aplicado \vec{B} .

Na Fig. 4.8 (a) apresentamos três densidades de estado ρ_σ em função da frequência ω para $E_f = -0,10; -0,05; -0,03$ e $B = 0$. No regime de flutuação de carga $E_f = -0,03$, existe uma larga ressonância no potencial químico, porém à medida que nos aproximamos do limite de Kondo $E_f = -0,10$, essa ressonância se estreita e se transforma no pico de Kondo; quanto mais larga for essa ressonância mais teremos flutuação de carga no

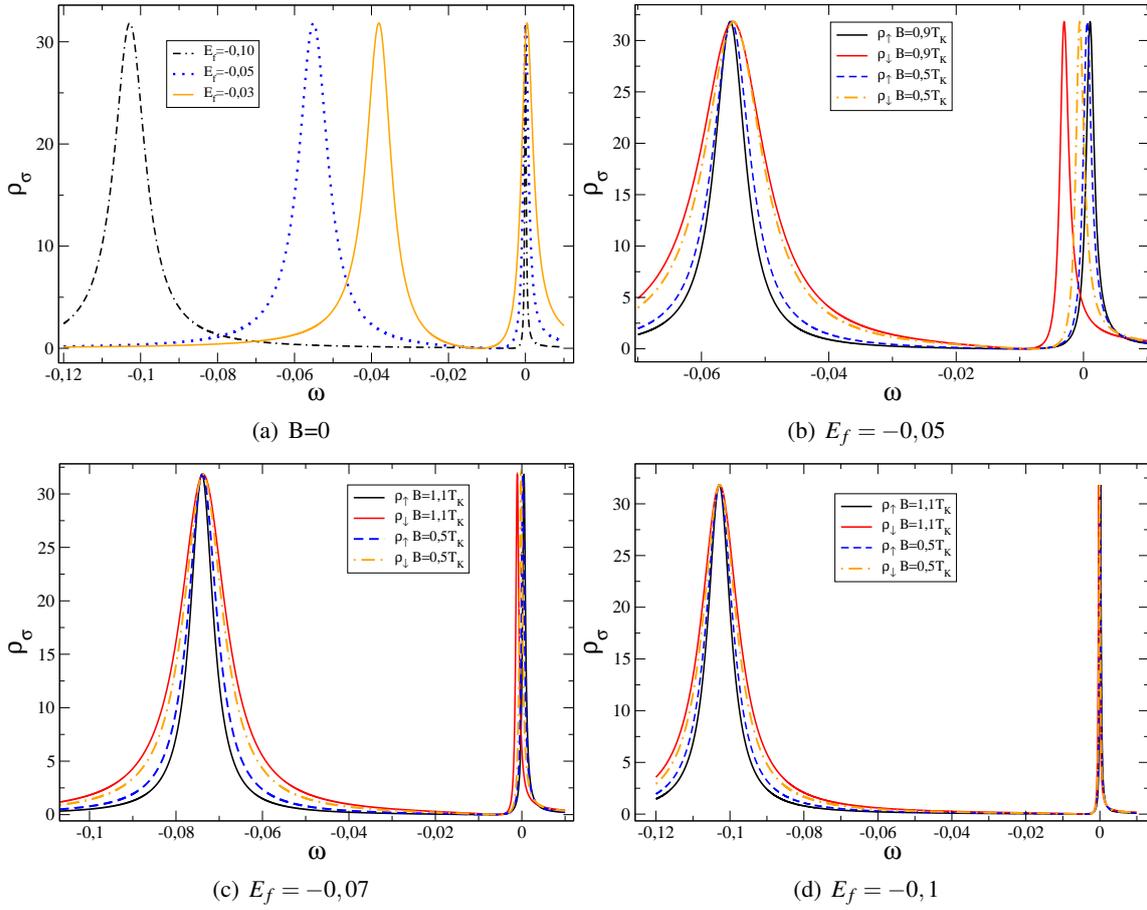


Figura 4.8: Densidades espectrais em função de ω para diferentes valores dos parâmetros externos E_f e B (Nível da impureza e campo magnético aplicado).

sistema (regime de valência intermediária) e quanto mais estreita for essa ressonância, menos flutuação de carga haverá no sistema e mais o sistema se aproximará do regime de Kondo. O segundo aspecto que deve ser observado é que a ressonância em E_f acompanha a variação do nível, enquanto a ressonância de Kondo fica presa ao potencial químico.

Nas Figs 4.8(b,c,d) consideramos as densidades de estado ρ_σ em função da frequência ω para $E_f = -0,05; -0,07; -0,10$ e $B \neq 0$. É interessante verificar que quando $E_f = -0,05$ o alargamento do pico de Kondo devido ao efeito Zeeman é bastante pronunciado, porém a medida que o E_f se torna mais negativo tornando o efeito Kondo mais robusto em $E_f = -0,10$, o efeito do campo Zeeman não é tão efetivo em destruir o estado Kondo.

Agora para fechar a discussão do caso da impureza, os parágrafos seguintes serão fo-

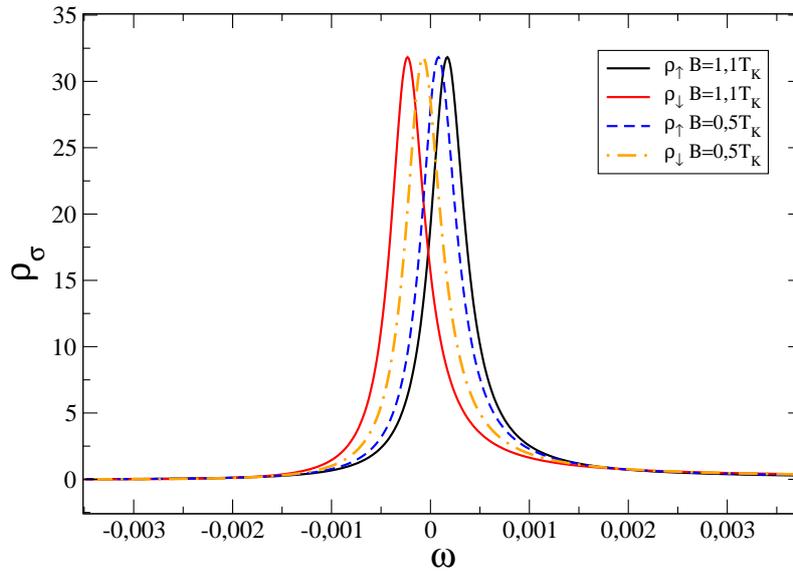


Figura 4.9: Densidade espectral para $E_f = -0,10$ com diferentes valores do campo magnético aplicado.

cados somente no desdobramento do pico de Kondo na densidade de estados. Inicialmente devemos observar que na figura 4.7 a magnetização cresce monotonicamente com E_f . A curva com $E_f = -0,07$ é a que apresenta maior contribuição à magnetização (região de valência intermediária) devido ao alargamento dos picos nessa região, ao passo que a curva com $E_f = -0,15$ é a que apresenta a menor contribuição (região Kondo) devido ao estreitamento dos picos nessa região. Podemos explicar este efeito através das figuras 4.9 e 4.10 onde apresentamos um zoom em torno da região Kondo ($\mu = 0$).

Vamos comparar por exemplo, as densidades com spin para cima e para baixo quando $B = 1,1T_K$ nas figuras 4.9 e 4.10. Para $E_f = -0,07$ os picos na região Kondo são mais largos do que para $E_f = -0,10$, e isto tem uma importância muito grande na magnetização porque segundo a expressão para o seu cálculo: $M = |n_\uparrow - n_\downarrow|$; onde $n_\sigma = \int_{-\infty}^{\mu} n_F(\omega) \rho_\sigma(\omega) d\omega$, com $n_F(\omega)$ sendo a função distribuição de Fermi, se um dos picos da região Kondo se afasta muito do potencial químico pela direita, ele irá contribuir pouco para a integral das ocupações porque como já é bem conhecido, a baixas temperaturas, $n_F(\omega)$ é zero para $\omega > \mu$.

Para uma melhor compreensão deste fato, analizaremos qualitativamente o valor da magnetização para a densidade espectral da Fig. 4.10 com $B = 1,1T_K$. Observe que o pico de Kondo com spin para cima está bem acima do potencial químico. Então sua

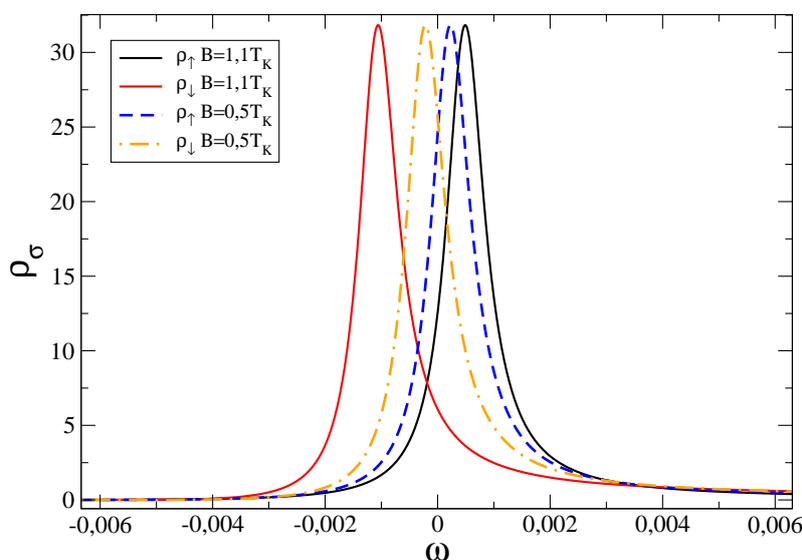


Figura 4.10: Densidade de estados para $E_f = -0,07$ com diferentes valores do campo magnético aplicado.

contribuição à ocupação será pequena. No entanto, a contribuição do pico com spin para baixo será grande porque esse pico está totalmente localizado abaixo do potencial químico. Além disso, na banda ressonante situada em torno de E_f (veja Fig. 4.8), ocorre um alargamento na contribuição com spin para baixo e um estreitamento na banda com spin para cima, o que aumenta a contribuição da banda com spin para baixo em relação a banda com spin para cima. Então mediante as figuras 4.8, 4.9 e 4.10 e a análise da expressão para a magnetização segundo o método atômico, fica explicado porque na Fig. 4.7 a magnetização cresce com o parâmetro E_f .

Na figuras 4.11 representamos a soma das densidades parciais com spin para cima e para baixo ($\rho_\uparrow + \rho_\downarrow$) das Fig's. 4.9, 4.10. Podemos observar nessa figura que o desdobramento do pico de Kondo é maior na densidade total com $E_f = -0,07$ (a curva vermelha) do que naquela com $E_f = -0,1$ (a curva preta). As densidades totais com $B = 0,5T_K$ não apresentam desdobramento do pico de Kondo, porém pode-se perceber que a largura delas é diferente. A densidade com $E_f = -0,07$ (curva laranja) é maior que aquela com $E_f = -0,1$ (curva pontilhada azul). Já na Fig. 4.11 (b) apresentamos as densidades totais para $E_f = -0,05$ e $-0,03$. Para esses valores de E_f o sistema está no regime de valência intermediária e como foi dito anteriormente o desdobramento é bem mais pronunciado nesse regime; veja a curva preta com $E_f = -0,05$ e $B = 0,9T_K$.

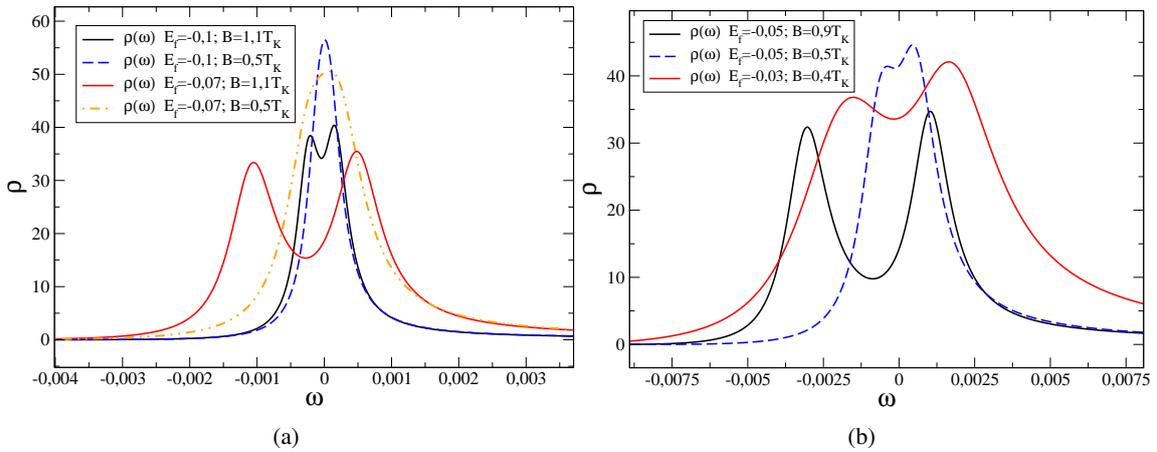


Figura 4.11: Densidade total em função de ω para $E_f = -0,1$ e $-0,07$. O campo magnético aplicado é $B = 1,1T_k$ e $0,5T_k$.

4.3 Condutância de um SET

Nesta seção empregaremos o método atômico para estudar o transporte eletrônico através de um QD imerso num canal balístico, e que está descrito teoricamente pelo SIAM no limite de correlação infinita ($U \rightarrow \infty$). A justificativa para esta geometria vem do fato de que um SET é a realização física deste arranjo.

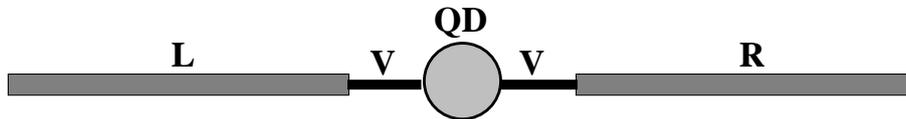


Figura 4.12: Visão pictórica de um ponto quântico imerso num canal balístico. Este sistema é realizado experimentalmente num transistor de um único elétron.

Teoricamente foi predito (38), (39) que um singlete tipo Kondo deveria ser formado num SET, que contém um conjunto de elétrons confinados numa região nanoscópica e que estão acoplados por meio de tunelamento quântico aos elétrons não localizados do canal balístico. No caso da correlação infinita, o QD pode ter zero ou um elétron em seu interior, e o estado de dupla ocupação é proibido nesse caso. Num artigo recente (40), foi usado a aproximação atômica no limite de $U \rightarrow \infty$, para calcular a condutância de um QD acoplado lateralmente aos canais balísticos. Nesta seção empregaremos o método atômico para estudar o transporte, porém será analisado o efeito na condutância de um campo magnético aplicado no QD que está imerso nos canais balísticos.

Na Fig. 4.12 apresentamos uma visão pictórica de um ponto quântico imerso num canal balístico, onde o QD é representado por um círculo e os canais balísticos a esquerda e direita por retângulos.

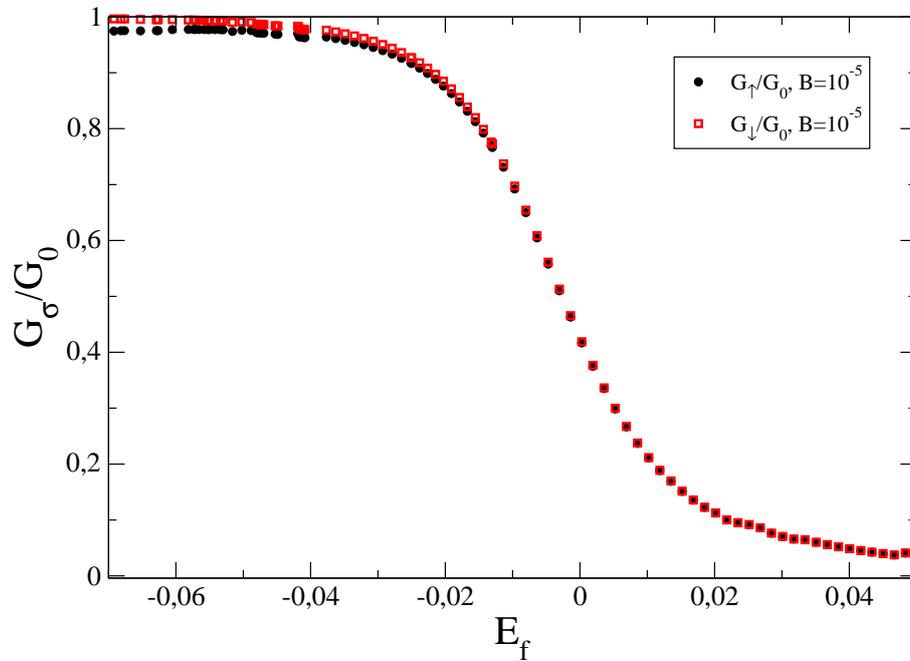


Figura 4.13: Condutância de um QD imerso num canal balístico no limite de correlação infinita, $U \rightarrow \infty$ e $T = 10^{-5}$.

O transporte eletrônico é coerente a baixas temperaturas e voltagens de porta, e a resposta linear da condutância é dada por uma fórmula do tipo Landauer (41),

$$G = \frac{2e^2}{\hbar} \int \left(-\frac{\partial n_F}{\partial \omega} \right) S(\omega) d\omega, \quad (4.4)$$

onde n_F é a função de Fermi e $S(\omega)$ é a probabilidade de transmissão de um elétron com energia $\hbar\omega$. Esta probabilidade é dada por,

$$S(\omega) = \Gamma^2 | \tilde{G}_\sigma |^2, \quad (4.5)$$

onde Γ corresponde a intensidade do acoplamento do sítio o ao canal balístico. A função de Green vestida $\tilde{G}_\sigma(\omega)$ no sítio do QD (42), pode ser escrita em termos da GF localizada do QD $G_\sigma^{ff}(\omega)$ e da GF dos elétrons não localizados $G_c^\sigma(\omega)$, considerados aqui como

aqueles do canal balístico:

$$\tilde{G}_\sigma(\omega) = G_c^\sigma(\omega)^2 V^2 G_\sigma^{ff}(\omega). \quad (4.6)$$

A GF localizada $G_\sigma^{ff}(\omega)$ é calculada neste trabalho por meio do método atômico desenvolvido no capítulo 3. Ali foi obtido a GF localizada na Eq. (3.10), e $G_c^\sigma(\omega)$ é calculada logo depois de fazer uma integral simples na variável ε de $G_0^\sigma(\varepsilon) = -1/(\omega - \varepsilon)$ para uma banda quadrada simétrica.

$$G_c^\sigma(\omega) = -(1/2D) \ln [(\omega + D)/(\omega - D)], \quad (4.7)$$

(onde $\omega \rightarrow \omega + i\eta$, com $\eta \rightarrow 0^+$).

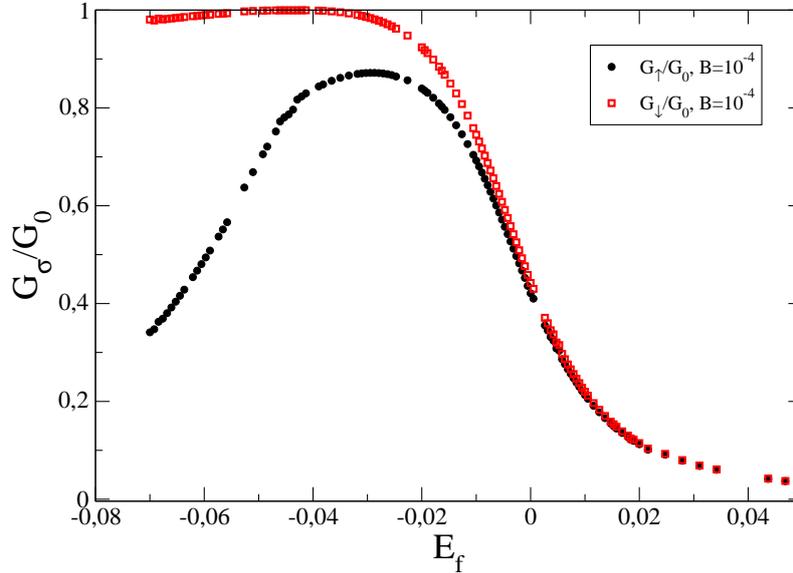


Figura 4.14: Condutância de um QD imerso num canal balístico no limite de correlação infinita, $U \rightarrow \infty$, $T = 10^{-5}$ e $B = 10^{-4}$.

Nas Figs. 4.13, 4.14, 4.15 e 4.16 são graficados a partir das equações 4.4-4.6, a condutância de um ponto quântico imerso num canal balístico no limite de correlação coulombiana infinita. Nestas Figs. apresentamos a condutância como uma função do parâmetro E_f para uma temperatura $T = 10^{-5}$ e diferentes valores de campos magnéticos.

O primeiro gráfico da condutância apresentado neste trabalho, Fig. 4.13, concorda com outros trabalhos amplamente conhecidos e desenvolvidos com outras técnicas (19), (43). Este comportamento da condutância surge como uma consequência da regra da

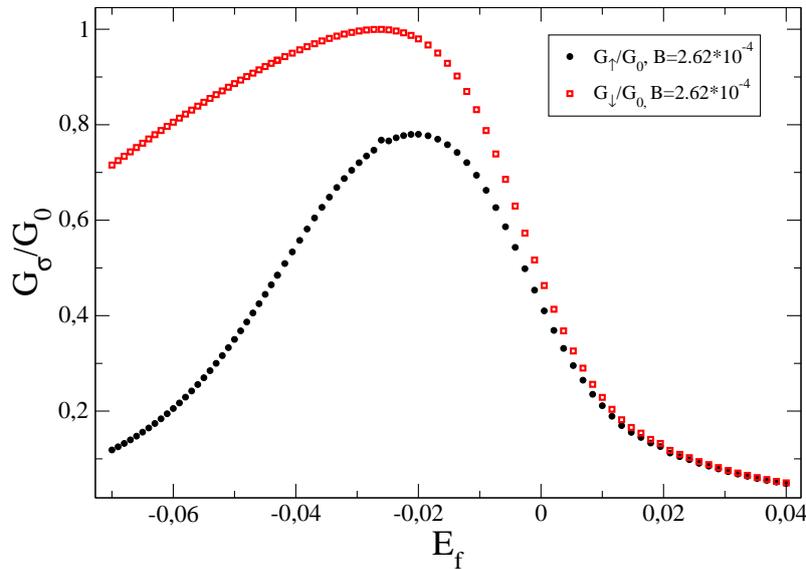


Figura 4.15: Condutância de um QD imerso num canal balístico no limite de correlação infinita, $U \rightarrow \infty$, onde os parâmetros do sistema são os seguintes $T = 10^{-5}$ e $B = 2.62 * 10^{-4}$.

soma de Friedel, onde a condutância está relacionada com as ocupações no QD através da seguinte formula,

$$G = G_{max} \sin^2\left(\frac{\pi}{2}n_f\right), \quad (4.8)$$

sendo n_f a ocupação no QD. Este resultado para a condutância é muito importante porque nos permite encontra-la uma vez seja conhecido a ocupação n_f . O valor do n_f pode ser encontrado por exemplo com o NRG ou com uma técnica conhecida como “non crossing approach”, ou com qualquer outra que seja válida. O valor da ocupação em função do E_f tem um comportamento característico bem conhecido, ela tem dois degraus um com uma altura 2 e outro com valor 1. O valor 2 corresponde ao regime de dupla ocupação e o valor 1 corresponde ao regime Kondo. A curva da ocupação é continua e não possui singularidades. No caso considerado neste trabalho o regime de dupla ocupação não existe porque se está no limite de $U \rightarrow \infty$, e por tanto o gráfico da condutância é da forma da Fig. 4.13.

Em todos os gráficos da condutância, é possível observar três importantes regimes. O primeiro é o regime do ponto quântico vazio, onde a condutância tende a zero. Nesta situação, o valor do nível localizado E_f é positivo e ele se encontra acima do potencial químico μ . Esse limite corresponde ao regime onde o número de ocupação dos elétrons

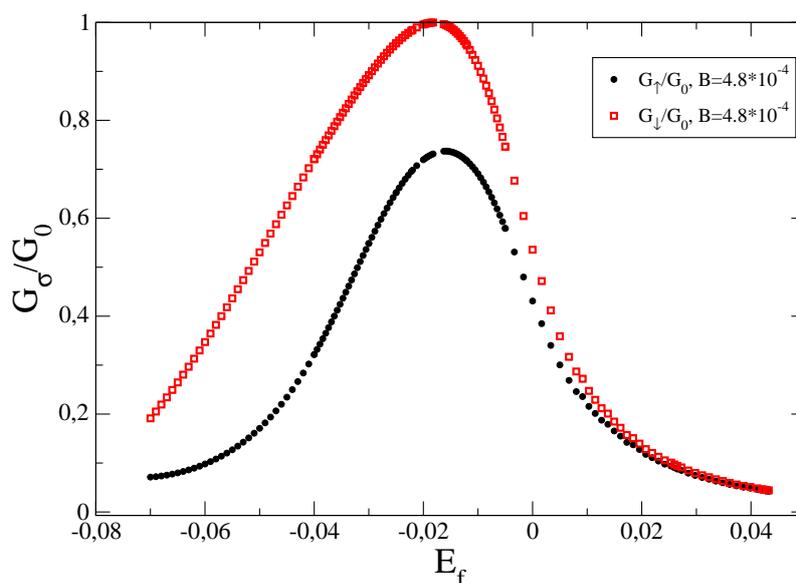


Figura 4.16: Condutância de um QD imerso num canal balístico no limite de correlação infinita, $U \rightarrow \infty$, onde os parâmetros do sistema são os seguintes $T = 10^{-5}$ e $B = 4.8 * 10^{-4}$.

localizados tende a zero ($n_f \rightarrow 0$). No regime do ponto quântico vazio não há efeito Kondo e a ressonância no potencial químico não está formada, com isto não é permitido que elétrons pulem do canal balístico da esquerda ao da direita passando pelo QD.

O regime seguinte é o de valência intermediária que começa em $E_f = 0,01$ e vai até $E_f = -0,02$, aproximadamente. Veja que o valor da condutância começa a crescer nesse intervalo, sendo o seu valor, aproximadamente o mesmo para as três figuras; para $E_f = 0,01$ a condutância vale aproximadamente 0.2 e para $E_f = -0,02$ o valor da flutua um pouco entre 0.7 e 0.9 dependendo do valor do campo magnético. Na figura 4.16 observamos que neste regime o efeito do campo magnético é muito importante, porque ele consegue fazer com que a condutância com spin para baixo cresça a uma taxa maior que aquela com spin para cima. Este mesmo comportamento é visto no gráfico das ocupações por grau de spin em função do E_f (Veja Fig. 4.18), onde o campo magnético aplicado faz com que as ocupações com spin para baixo sejam maiores que aquelas com spin para cima para os campos magnéticos $0.5T_K$ e $1.1T_K$. Nesse regime, o valor do número de ocupação f varia substancialmente devido as flutuações de carga e os efeitos de interferência quântica começam a crescer e a ressonância de Kondo também começa a formar-se no potencial químico μ , assim aumentando substancialmente o valor da condutância.

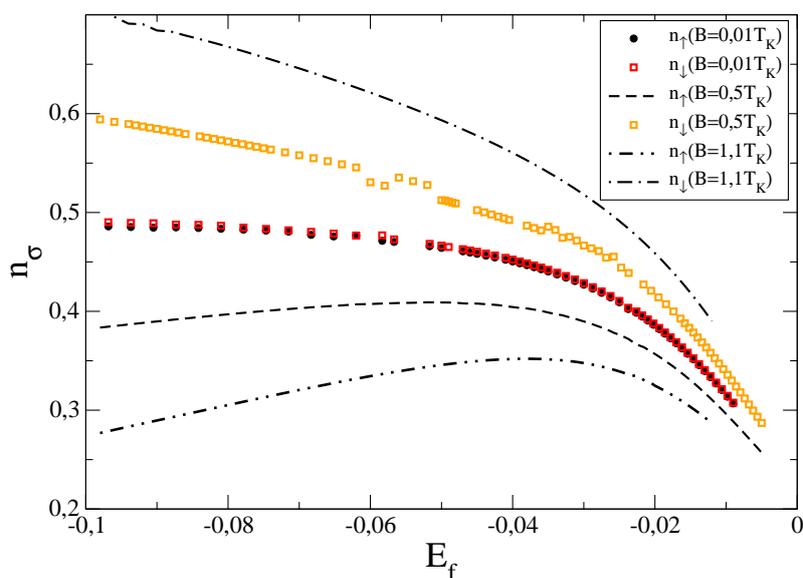


Figura 4.17: Números de ocupação para cada grau de liberdade de spin com diferentes valores do campo magnético B . A temperatura de Kondo neste caso foi obtida a partir da metade da largura do pico de Kondo para $E_f = -0.1$. O valor do T_K obtido foi: $2.2144 * 10^{-4}$.

O último regime a ser analisado é o de Kondo. Ele tem um comportamento bem diferente para os três valores do campo magnético. Quando o campo magnético é pequeno, por exemplo $B = 10^{-5}$ (Fig. 4.13) veja que cada condutância tende para o valor 1, independentemente do grau de liberdade de spin. No entanto nas figuras seguintes 4.14-4.16, o campo magnético separa as contribuições de cada grau de liberdade de spin. Sendo este efeito bem diferente nas Figs 4.14 e 4.16. Na Fig. 4.14, onde $B = 10^{-4}$ somente a contribuição dos spins para baixo tende para o valor 1 quando E_f é muito negativo, a contribuição com spins para cima diminui e se separa da contribuição dos spins para baixo.

Na Fig. 4.15, onde $B = 2.62 * 10^{-4}$ a intensidade do campo magnético é tal que a condutância com spin para baixo passa a decrescer e não mais assume o valor unitário assim como a contribuição dos elétrons com spin para cima. O decréscimo do valor normalizado unitário é explicado com ajuda da Fig. 4.18, onde as ocupações são graficadas para diferentes valores do campo magnético. Para campos pequenos, por exemplo $B = 0.01T_K$, as ocupações para cada grau de liberdade de spin tendem para 0.5, que é o valor máximo que cada uma pode assumir. Isto tem como consequência que a condutância normalizada também vai para um quando E_f é muito negativo. Para $B = 0.5T_K$ e $B = 1.1T_K$ o campo

magnético desdobra as ocupações também para E_f muito negativo com n_\uparrow diminuindo e n_\downarrow aumentando, e isto está associado com a queda da condutância nas Figs. 4.14 e 4.16 porque quando cada grau de liberdade das ocupações se afasta do valor $1/2$ a ressonância Kondo não se forma no potencial químico e isto impede a perfeita transmissão dos elétrons através da ressonância. No caso paramagnético, quando $n_\sigma \rightarrow 0.5$, a ressonância Kondo no potencial químico permitia a passagem dos elétrons através do QD.

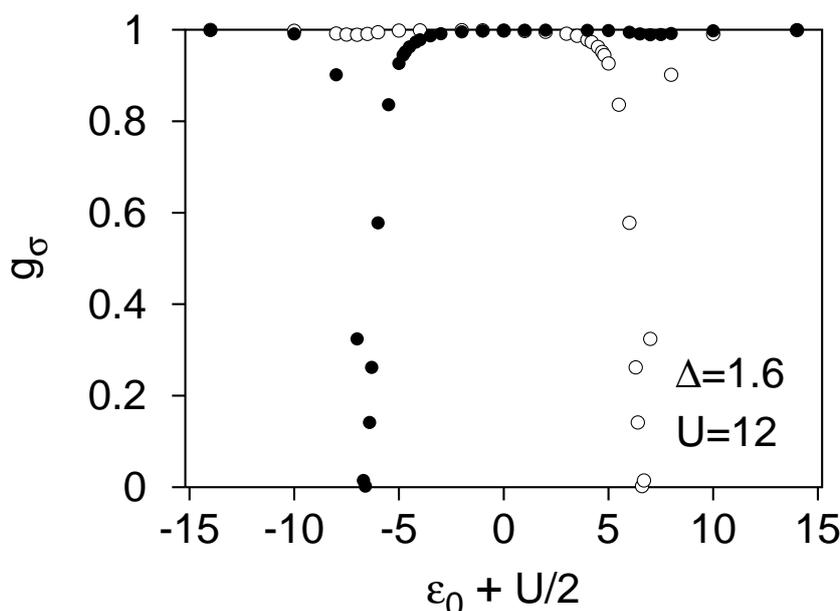


Figura 4.18: Condutância dos canais “up” e “down” de um QD acoplado lateralmente a um canal balístico. Estes resultados foram obtidos numericamente por Torio et. al. (43), onde U é o valor da repulsão Coulombiana e Δ é o desdobramento Zeeman.

Os resultados da condutância desta seção tem uma interessante aplicação na spintrônica, especialmente na implementação dos filtros de spin. A Fig. 4.14 mostra que no regime Kondo a condutância normalizada do canal “down” é 1 (perfeita transmissão) e do canal “up” é menor que 0.4. Isto quer dizer que se está permitindo o fluxo de partículas com spin “down” e um amortecimento do fluxo de partículas com spin “up”. Um filtro deste tipo já foi sugerido num outro trabalho com uma outra simetria (43), onde o ponto quântico está acoplado lateralmente a um canal balístico e que por causa da ressonância Fano o valor da condutância mostra uma queda considerável num valor específico de ϵ_0 para cada canal da condutância. O interessante deste resultado é que a queda na condutância de cada canal é atingido em dois valores diferentes de ϵ_0 , permitindo-se só o fluxo de partículas com

uma componente do spin.

4.4 O modelo de Anderson periódico

Para calcular as GF's do PAM vamos considerar a banda de condução representada por uma banda quadrada de largura $2D$. Para calcular a GF dos elétrons localizados, somamos a Eq. 3.6 para todo k sobre a banda de condução, ou seja, substituímos a soma em k por uma integral na variável ε , que representa a energia; $\sum_k \rightarrow \frac{1}{2D} \int [\dots] d\varepsilon$. A integral na variável, ε , é muito simples de calcular, porque os cumulantes só dependem da frequência ($z = \omega + i\eta$). Assim obtemos

$$G_{f\sigma}^{per}(z) = \frac{M_{\sigma}^{at}(z)}{2D} \int_{-D}^D \frac{(z - \varepsilon)d\varepsilon}{z - \varepsilon + M_{\sigma}^{at}(z)|V|^2}. \quad (4.9)$$

Efetuada a integração obtemos a GF dos elétrons localizados para o PAM como sendo dada por

$$G_{f\sigma}^{per}(z) = \frac{M_{\sigma}^{at}(z)}{2D} \left\{ M_{\sigma}^{at}(z)V^2 \ln \left[\frac{z - D + M_{\sigma}^{at}(z)V^2}{z + D + M_{\sigma}^{at}(z)V^2} \right] + 2D \right\}. \quad (4.10)$$

Nesta seção discutiremos a última das aplicações do método atômico desenvolvido ao longo desta dissertação de mestrado. Nosso objetivo apresentar a densidade total de estados para o PAM também em presença de um campo magnético aplicado sobre os elétrons localizados. As densidades de estados serão obtidas a partir da GF do PAM segundo a aproximação atômica (veja Eq.'s 4.9 e 4.10). Nesse caso, as GF's do PAM foram obtidas a partir dos cumulantes atômicos do caso da impureza, onde a GF aproximada da impureza foi obtida autoconsistentemente através da satisfação da regra da soma de Friedel generalizada.

Na Fig. 4.19, representamos uma densidade de estados típica para os spins "para cima" da rede de Anderson, obtida com o método atômico para $E_f = -0.07$. É interessante observar que essa densidade apresenta dois "gaps"; um localizado em torno do nível $E_f = -0.07$, que é o "gap" de hibridização e outro extremamente abrupto, localizado em torno do potencial químico μ , resultante da abertura do pico de Kondo e que governa o comportamento dos isolantes de Kondo (15).

Na Fig. 4.20 apresentamos o detalhe do gap em torno do potencial químico da Fig. 4.19 para vários valores do campo magnético aplicado: (a) é possível observar a existência

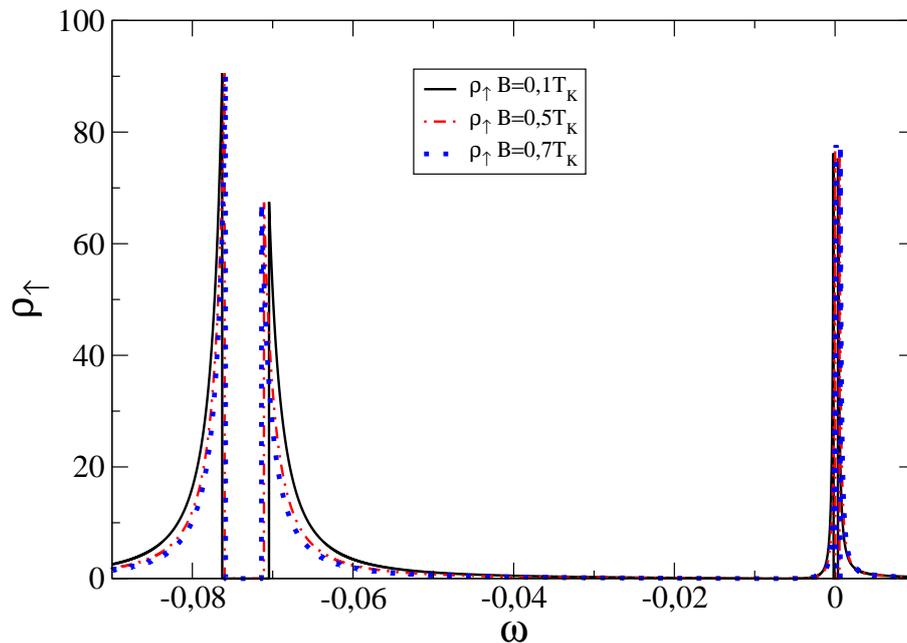


Figura 4.19: Densidade de estados para os spins “para cima” para a rede de Anderson em presença do campo magnético aplicado.

de um gap de $4 * 10^{-4}$ unidades de largura de banda $D = 1.0$, em torno do potencial químico $\mu = 0$. Esta densidade foi obtida para um valor do campo magnético (B) muito pequeno, $B = 0.1T_K$, onde esta temperatura de Kondo foi dada pela largura do gap a $B = 0$. Em (b) observe que a largura do gap é reduzida para $1.1 * 10^{-4}$ quando o campo magnético vale $B = 0.4T_K$. A redução do gap continua a ocorrer a medida que o campo magnético aumenta, atingindo um valor onde o gap se fecha em $B = 0.5T_K$ aproximadamente. Para as outras figuras (d), (e) e (f) o comportamento é em geral o mesmo, o gap já não existe mais e uma densidade de estados começa a desenvolver-se em torno do potencial químico.

O resultado do fechamento do gap na densidade total de estados da rede de Anderson devido ao campo magnético aplicado, gera uma transição isolante-metal no sistema que tem sido induzida em muitos sistemas de fermions pesados com o objetivo de estudar a criticalidade quântica (11).

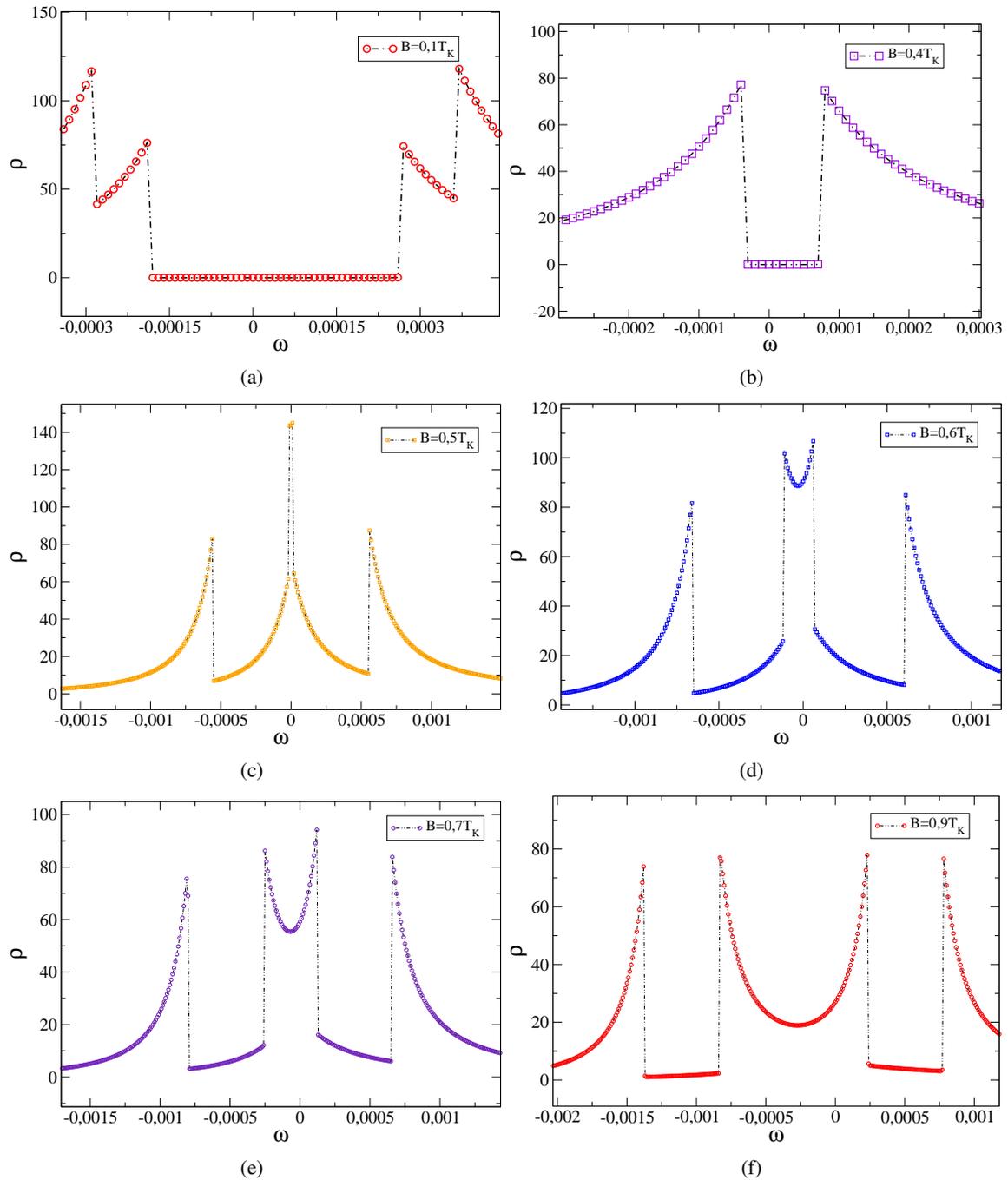


Figura 4.20: Densidades total de estados para a rede de Anderson em presença do campo magnético aplicado.

5 *Conclusões e perspectivas*

De um modo geral, esta dissertação está dividida em duas partes: A primeira trata sobre a implementação do método atômico a este caso particular, onde um campo magnético é aplicado sob o elétron localizado, e a segunda onde a partir dos resultados da primeira parte é obtido importantes resultados como o desdobramento do pico de Kondo, os gráficos do deslocamento de fase, a magnetização da impureza, a condutância através de um ponto quântico imerso num canal balístico e a extensão do método para a rede de Anderson. No trabalho original, onde o método atômico foi desenvolvido, (37), não foi considerado a influência de um campo magnético sob a impureza. Portanto, com esta dissertação se consegue ampliar as aplicações do método e sua validade.

A solução exata das funções de Green formalmente é conhecida para o modelo da impureza de Anderson em termos de um cumulante efetivo que não é simples de se calcular, uma vez que o seu conhecimento gera a solução exata do problema, mas que no método atômico esse cumulante é substituído pelo cumulante exato da solução atômica. Porém, as GF's obtidas desse modo, em geral não satisfazem a regra de soma generalizada de Friedel que leva em conta a presença de um campo magnético aplicado na impureza. No entanto, variando a posição do nível dos elétrons de condução $\xi_{q\sigma}$ da solução exata, é obtido a baixas temperaturas, um par de soluções que satisfazem a regra de soma generalizada, onde é escolhido dentre essas soluções, aquela que esteja mais próxima ao potencial químico, pois é a que apresenta a menor energia livre de Helmholtz, (37) e a identificamos como sendo a solução Kondo.

A partir do método atômico, tendo a regra de soma como vínculo, foi encontrado curvas de densidades de estados em função da frequência, e com os parâmetros externos: energia do nível localizado (E_f) e campo magnético aplicado (B). Do trabalho anterior a este, sobre o método atômico, foi obtido que a temperatura tinha que ser muito baixa, menor que a temperatura de Kondo do sistema, para que a aproximação fosse válida.

Logo ao longo desta dissertação ela foi deixada fixa a um valor menor que T_K . A razão básica para isso é que a regra de soma de Friedel, que é usada como vínculo só é válida para $T = 0.0$.

O primeiro resultado importante deste trabalho foi o desdobramento do pico de Kondo num campo magnético crítico. Costi (34) encontrou resultados similares usando o NRG para o modelo de Kondo. Também apresentamos gráficos do deslocamento de fase e da magnetização, que foram comparados com os resultados analíticos exatos do Ansatz de Bethe. No regime de Kondo ($E_f = -0.15$) os métodos concordam muito bem, isto porque o modelo de Kondo é o limite de baixas energias do hamiltoniano de Anderson. Já na região de transição do regime de Kondo para valência intermediária ($E_f = -0.07$) começam a existir diferenças que são razoáveis porque as flutuações de carga deixam de ser desprezíveis. Também foi feita uma aplicação simples do modelo a um ponto quântico imerso num canal balístico. O cálculo da condutância foi efetuado a partir da fórmula de Landauer, e foi observado que o campo magnético destrói o limite unitário $G_\sigma/G_0 \rightarrow 1$ da condutância no regime Kondo. Finalmente fizemos a extensão do método para a rede de Anderson.

Dentro das perspectivas futuras do trabalho encontramos as seguintes aplicações: como o método fornece uma descrição bastante precisa do efeito Kondo a baixas temperaturas, pretendemos continuar com o estudo de sistemas nanoscópicos baseados em grafeno e nanotubos de carbono com pontos quânticos imersos ou acoplados. Por exemplo uma primeira tentativa já foi feita com o cálculo da condutância para um nanotubo de carbono do tipo zig-zag com um ponto quântico acoplado lateralmente (16). Outras opções com diferentes simetrias poderiam ser consideradas para enriquecer mais o método no que diz respeito à física do problema. Uma opção de aplicação bastante atual é o estudo de problemas de átomos magnéticos dissolvidos em superfícies metálicas, onde as medidas são realizadas por espectroscopia de efeito túnel.

Outra possibilidade de trabalho futuro é a extensão do método atômico para duas impurezas interagentes onde recentemente foi predito a existencia de um ponto crítico quântico (44) como consequência da competição entre o efeito Kondo e uma interação de troca. No caso do PAM também podemos continuar com o estudo dos estados fundamentais e tentar encontrar funções de correlação que nos permitam verificar a existência de pontos críticos quânticos.

Referências Bibliográficas

- 1 M. P. Sarachik, E. Corenzwit and L. D. Longinotti, *Phys. Rev.* **135**, A1041 (1964)
- 2 P. W. Anderson, *Phys. Rev.* **124**, 41 (1961).
- 3 A. J. Heeger, *Solid State Phys.* **23**, 283 (1969).
- 4 A. M. Clogston, et. al. *Phys. Rev.* **125** 541 (1962).
- 5 J. Kondo, Resistance Minimum in Dilute Magnetic Alloys, *Prog. Theor. Phys.* **32**, 37 (1964).
- 6 H. R. Krishna-murthy, J. W. Wilkins, and K. G. Wilson, *Phys. Rev. B* **21**, 1003 (1980).
- 7 H. R. Krishna-murthy, J. W. Wilkins, and K. G. Wilson, *Phys. Rev. B* **21**, 1044 (1980).
- 8 P. W. Anderson, Basic Notions of Condensed Matter Physics (The Benjamin/Cummings Publishing Company, inc. Menlo Park, California, 1984).
- 9 R. Bulla, T. A. Costi, and T. Pruschke. *Rev. Mod. Phys.* **80** 395 (2008).
- 10 K. Andres, J.E. Graebner and H.R. Ott (1975) *Phys. Rev. Lett.* **35** 1779 (1975)
- 11 M. A. Continentino, *Braz. Jour. Phys.* **35**, 197 (2005).
- 12 Helmut Kronmüller (Editor) and Stuart Parkin (Editor), Handbook of Magnetism and Advanced Magnetic Materials, 5 Volume Set (Wiley - interscience, inc. 2007)
- 13 Lizardo H. C. M. Nunes, M. S. Figueira, and E. V. L. de Mello, *Phys. Rev. B* **68**, 134511 (2003).
- 14 L. Degiorgi, *Rev. Mod. Phys.* **71**, 687 (1999).
- 15 A Severing, J. D. Thompsom, P. C. Canfield, Z. Fisk and P. Riseborough, *Phys. Rev. B* **44**, 6832 (1991).
- 16 T. Lobo - Tese de Doutorado - Instituto de Física - Universidade Federal Fluminense - (2009).
- 17 A. S. Edelstein, *J. Magn. Magn. Mater.* **256**, 430 (2003)
- 18 G. R. Stewart, *Rev. Mod. Phys.* **73**, 797 (2001).
- 19 D. Goldhaber-Gordon et al. *Phys. Rev. Lett.* **81**, 5225 (1998).
- 20 D. Goldhaber-Gordon, et. al. *Nature* **391** 156-159 (1998).

- 21 T. Lobo, M.S. Figueira, R. Franco, J. Silva-Valencia e M.E. Foglio, *Physica B* **398**, 447 (2007).
- 22 A. C. Hewson, *The Kondo Problem to Heavy Fermions* (Cambridge University Press, Cambridge, UK, 1993)
- 23 Y. Nagaoka, *Phys. Rev.* **138**, A1112 (1965).
- 24 D. H. Y. Yang e Y. L. Wang, *Phys. Rev. B* **10**, 4714 (1975).
- 25 D. N. Zubarev *Soviet Phys. Uspekhi* **3**, 320 (1960).
- 26 M.S. Figueira, M.E. Foglio, and G.G. Martinez, *Phys. Rev. B* **50**, 17933 (1994)
- 27 M. E. Foglio and M. S. Figueira, *Phys. Rev. B* **60**, 11361 (1999)
- 28 R. Franco, M. S. Figueira and M. E. Foglio, *Phys. Rev. B* **66**, o45112 (2002)
- 29 C. M. Varma, *Phys. B Cond. Matt. mathbf*359 – 361, 1478 (2005).
- 30 S. G. Ovchinnikov and V. V. Val'kov, *Hubbard Operators In The Theory of Strongly Correlated Electrons* (Imperial College Press, London, UK, 2004).
- 31 D. C. Langreth, *Phys. Rev.* **150**, 516 (1966).
- 32 A. Tsvetlick and P. B. Wiegmann, *Adv. in Phys.* **32**, 453 (1983).
- 33 P. Mehta, N. Andrei, P. Coleman, et. al. *Phys. Rev. B* **72**, 014430 (2005).
- 34 T. A. Costi, *Phys. Rev. Lett.* **85**, 1504 (2000)
- 35 J. Hubbard, *Proc. R. Soc. London, Ser. A* **285**, 542 (1965)
- 36 J. R. Schrieffer and P. A. Wolff, *Phys. Rev.* **149**, 491 (1966).
- 37 T. Lobo, M. S. Figueira and M. E. Foglio, *Nanotechnology* **17**, 6016 (2006).
- 38 Ng, T. K. ans Lee, P. A. *Phys. Rev. Lett.* **61**, 1768 (1988).
- 39 Glazman, L. I. and Raikh, M. E. *JETP Lett.* **47**,452 (1988).
- 40 R. Franco, M. S. Figueira and E. V. Anda, *Phys. Rev. B* **67**, 155301 (2003).
- 41 K. Kang, S. Y. Cho, J. J. Kim, and S. C. Shin, *Phys. Rev. B* **63**, 113304 (2001).
- 42 A. A. Aligia and C. R. Proetto, *Phys. Rev. B.* **65**, 165305 (2002).
- 43 M. E. Torio, K. Hallberg, et. al. *Eur. Phys. J. B.* **37**], 399 (2004).
- 44 Zarand G., Chung C.-H., Simon P. and Vojta M. *Phys. Rev. Lett.* **97** 166802 (2006)