

**Thiago Lobo Fonseca**

**Modelo atômico para a impureza de Anderson**

Dissertação apresentada ao Curso de Pós-Graduação em Física, como requisito parcial  
para obtenção do título de Mestre em Física

Universidade Federal Fluminense

Instituto de Física

Orientador: **Dr. Marcos Sérgio Figueira**

Niterói - Rio de Janeiro.

2005

**Agradecimentos:**

Aos meus pais: Marcos Teodorico Linhares Fonseca e Liana Lobo Fonseca, pelo incentivo e por nunca me deixarem desistir dos meus sonhos, apesar das dificuldades.

Aos meus irmãos, de sangue ou não: Marina Lobo Fonseca, Gabriel Lobo Fonseca e Estevão M. Lobo de Castro, pelo apoio.

A Juliana: pelo incentivo que me deu e paciência que teve comigo, principalmente nos meus piores dias.

Ao meu orientador, Marcos Sérgio Figueira: por tudo que aprendi nesses dois anos, pelo apoio, incentivo e dedicação com que me orientou.

Aos novos e velhos amigos: Daniel, Minos, Marcus, Klauco, Aquino, Gralha, entre outros, pela ajuda e pelos mais diversos e agradáveis assuntos que tratamos.

Ao CNPq pelo financiamento.

## Resumo

Neste trabalho, propomos um modelo aplicando uma extensão do modelo atômico, para descrever sistemas mesoscópicos que podem ser modelados pela impureza de Anderson e que apresentem o efeito Kondo. O modelo atômico para a impureza de Anderson consiste basicamente em tratar a impureza de Anderson com uma aproximação utilizando a solução exata do modelo atômico. Calculamos funções de Green aproximadas para a impureza de Anderson, obtidas a partir da solução exata do sistema no limite de largura da banda de condução nula, e usando a condição de completude para escolher a posição da banda. A baixas temperaturas, existem algumas soluções próximas ao potencial químico  $\mu$ , que satisfazem essa condição, escolhemos então, aquela de menor energia livre de Helmholtz, que consideramos correspondendo à solução Kondo. A altas temperaturas, essa solução desaparece, correspondendo ao desaparecimento do pico de Kondo. Apresentamos curvas de densidade de estados que caracterizam bem a estrutura do pico de Kondo. Nossos resultados possuem uma boa concordância com os resultados obtidos por Costi com o formalismo do grupo de renormalização cujos resultados são considerados exatos. Como uma aplicação, calculamos a condutância de um ponto quântico acoplado lateralmente a um canal balístico obtendo uma boa concordância com os resultados experimentais.

## Abstract

In this work, we propose a model applying an atomic model extension, to describe mesoscopic systems that can be modeled by Anderson's impurity model and that presents Kondo effect. The atomic model to Anderson's impurity consists basically to treat the Anderson's impurity with an approximation using the exact solution of the atomic model. We calculate approximate Green's functions of the impurity Anderson model employing the exact solutions of the system with a conduction band with zero width, and we use the completeness condition to choose the position of that band. At low temperatures, there are some solutions close to the chemical potential  $\mu$ , satisfying this condition, and we choose the one with minimum Helmholtz free energy, so we consider that this corresponds to the Kondo solution. At high temperatures, this solution disappears, which corresponds to the vanishing of the Kondo peak. We present curves of density of states that characterize well the Kondo peak structure. Our results give a very good agreement with those obtained by Costi with the renormalization group formalism. As an application we calculate the conductance of a side-coupled quantum dot and we obtain good agreement with experimental results.

# Sumário

|          |  |           |
|----------|--|-----------|
| <b>1</b> | <b>Introdução</b>  | <b>9</b>  |
| 1.1      | Origem do efeito Kondo . . . . .   | 9         |
| <b>2</b> | <b>Modelo Atômico</b>  | <b>14</b> |
| 2.1      | O modelo de Anderson periódico . . . . .   | 14        |
| 2.2      | Solução atômica . . . . .  | 17        |
| 2.3      | O modelo atômico para a impureza de Anderson . . . . .                                   | 23        |
| 2.4      | Cálculo da energia livre de Helmholtz . . . . .  | 25        |
| 2.5      | Análise dos resultados do modelo atômico . . . . .                                       | 27        |
| <b>3</b> | <b>Pontos quânticos</b>  | <b>47</b> |
| 3.1      | Condutância de um ponto quântico acoplado lateralmente a um canal<br>balístico . . . . . | 48        |
| 3.2      | Resultados . . . . .   | 50        |
| <b>4</b> | <b>Conclusões e perspectivas</b>   | <b>53</b> |
| <b>A</b> | <b>Operadores de Hubbard</b>   | <b>55</b> |

# Lista de Figuras

|     |   |    |
|-----|---|----|
| 1.1 | Momentos magnéticos de ligas diluídas. . . . .  | 10 |
| 1.2 | Resistividade de ligas de ferro em cobre. . . . .   | 12 |
| 2.1 | Energias $\varepsilon_{n,r} = E_{n,r} - n\mu$ dos doze autoestados $ n, r\rangle$ do limite atômico. Os autoestados correspondentes aos diferentes números de ocupação $n = 0, 1, 2, 3$ estão desenhados em colunas diferentes. O índice $r$ que caracteriza os estados está escrito acima dos níveis correspondentes e as linhas que ligam os diferentes níveis estão identificadas pelos números $i$ , mostrando as possíveis transições $u_i$ que contribuem para a função de Green. . . . . | 22 |
| 2.2 | Completeza como função de $\xi$ para diferentes temperaturas. . . . .   | 27 |
| 2.3 | Energia livre de Helmholtz como função de $\xi$ para um conjunto de parâmetros particular. . . . .  | 28 |
| 2.4 | Densidade de estados para $T = 0.01\Delta$ com $E_f = -5.0\Delta$ . No detalhe da figura podemos observar as três estruturas, em $T = 0.01\Delta$ , que irão originar o pico de Kondo. . . . .  | 30 |
| 2.5 | Densidade de estados para $T = 0.001\Delta$ com $E_f = -5.0\Delta$ . No detalhe da figura podemos observar as três estruturas que irão originar o pico de Kondo. Note que os picos se tornam mais largos com a diminuição da temperatura. . . . .   | 31 |

- 2.6 Densidade de estados para  $T = 0.0005\Delta$  com  $E_f = -5.0\Delta$ . No detalhe da figura podemos observar a formação do pico de Kondo. Nessa temperatura podemos ver que o pico central praticamente domina sobre as outras duas estruturas. . . . . 32
- 2.7 Densidade de estados para  $T = 0.0001\Delta$  com  $E_f = -5.0\Delta$ . No detalhe da figura podemos observar a formação do pico de Kondo. Nessa temperatura podemos ver que o pico de Kondo está completamente formado. . . . . 33
- 2.8 Densidade de estados para  $T = 0.0001\Delta$  com  $E_f = +2.0\Delta$ . Esse conjunto de parâmetros corresponde ao regime vazio. . . . . 34
- 2.9 Densidade de estados para  $T = 0.0001\Delta$  com  $E_f = 0.0\Delta$ . Esse conjunto de parâmetros corresponde ao regime de velência intermediária. 35
- 2.10 Densidade de estados para  $T = 0.0001\Delta$  com  $E_f = -3.0\Delta$ . Esse conjunto de parâmetros corresponde ao início do regime Kondo. . . . 36
- 2.11 Densidade de estados para  $T = 0.0001\Delta$  com  $E_f = -5.0\Delta$ . Esse conjunto de parâmetros corresponde ao regime Kondo. . . . . 37
- 2.12 Densidade de estados para  $T = 0.0001\Delta$  com  $E_f = -7.0\Delta$ . Esse conjunto de parâmetros corresponde ao regime Kondo extremo. . . . 38
- 2.13 Densidade de estados para  $T = 0.0001\Delta$  com  $E_f = -10.0\Delta$ . Esse conjunto de parâmetros corresponde ao limite unitário do regime Kondo, onde  $n_f \simeq 1$  e o pico de Kondo está muito bem localizado sobre o potencial químico. . . . . 39
- 2.14 Densidade de estados para  $T = 0.0001\Delta$  e  $E_f = (+2.0; 0.0; -3.0; -5.0; -10.0)\Delta$ . Detalhe do pico de Kondo. . . . . 40
- 2.15 Densidade de estados no potencial químico para  $T = 0.0001\Delta$ , como função de  $E_f$ . Comparação entre GRN, NCA e modelo atômico com e sem completudeza. . . . . 41

|      |   |    |
|------|---|----|
| 2.16 | Densidade de estados no potencial químico para $T = 0.000001\Delta$ , como função de $E_f$ . Veja na figura o excelente acordo da regra de soma de Friedel com o modelo atômico. . . . .  | 42 |
| 2.17 | Números de ocupação como função de $E_f$ para o modelo atômico, GRN e NCA. . . . .  | 43 |
| 2.18 | Números de ocupação para o modelo atômico como função de $T$ . . . . .  | 44 |
| 2.19 | Comportamento logarítmico para a temperatura de Kondo. . . . .  | 45 |
| 2.20 | Densidade de estados para os elétrons $f$ no potencial químico $\mu$ como função da temperatura. . . . .  | 46 |
| 3.1  | Imagem pictórica de um QD acoplado a um canal balístico. . . . .  | 49 |
| 3.2  | Condutância (em unidades de $G_0$ ) como uma função da posição do nível eletrônico no QD, para diferentes valores de temperaturas. . . . .  | 50 |
| 3.3  | Ângulo de fase entre os elétrons provenientes do canal balístico e elétrons do ponto quântico. Na região Kondo ( $n_f \sim 1$ ), o ângulo $\phi$ tende à $\pi/2$ e a condutância vai à zero. Este é um efeito puramente quântico associado com a correlação Kondo e pode ser entendido em termos da interferência destrutiva entre o canal balístico e a ressonância Kondo. . . . . | 51 |
| 3.4  | Condutância (em unidades de $G_0$ ) e o logaritmo de $T_K/T$ como função da posição do nível eletrônico no ponto quântico. . . . .  | 52 |

# Capítulo 1

## Introdução

### 1.1 Origem do efeito Kondo

Resultados experimentais indicam que quando íons de impurezas magnéticas como ferro, cobalto ou níquel são dissolvidos em uma matriz metálica, pode ocorrer a formação de momentos magnéticos localizados. Embora os momentos observados possam diferir de um metal para outro, sua formação depende, principalmente, das propriedades do metal hospedeiro. Em um trabalho fundamental, Clogston *et. al.* [1] dissolveram impurezas de ferro, a concentrações muito baixas em vários metais de transição da segunda coluna (Zr,Nb,Mo,Re,Ru,Rh,Pd) e observaram que só havia formação de momentos localizados em alguns dos compostos (Mo,Rh e Pd), ao passo que nos restantes (Zr,Nb,Re,Ru), estes momentos não se formavam (veja Fig.(1.1)). Para impurezas magnéticas dissolvidas em isolantes, sempre haverá a formação de momentos de acordo com a regra de Hund.

Nas medidas de susceptibilidade magnética, observou-se que nas amostras que apresentavam formação de momentos localizados, além da susceptibilidade de Pauli usual, havia também uma susceptibilidade que dependia fortemente da temperatura

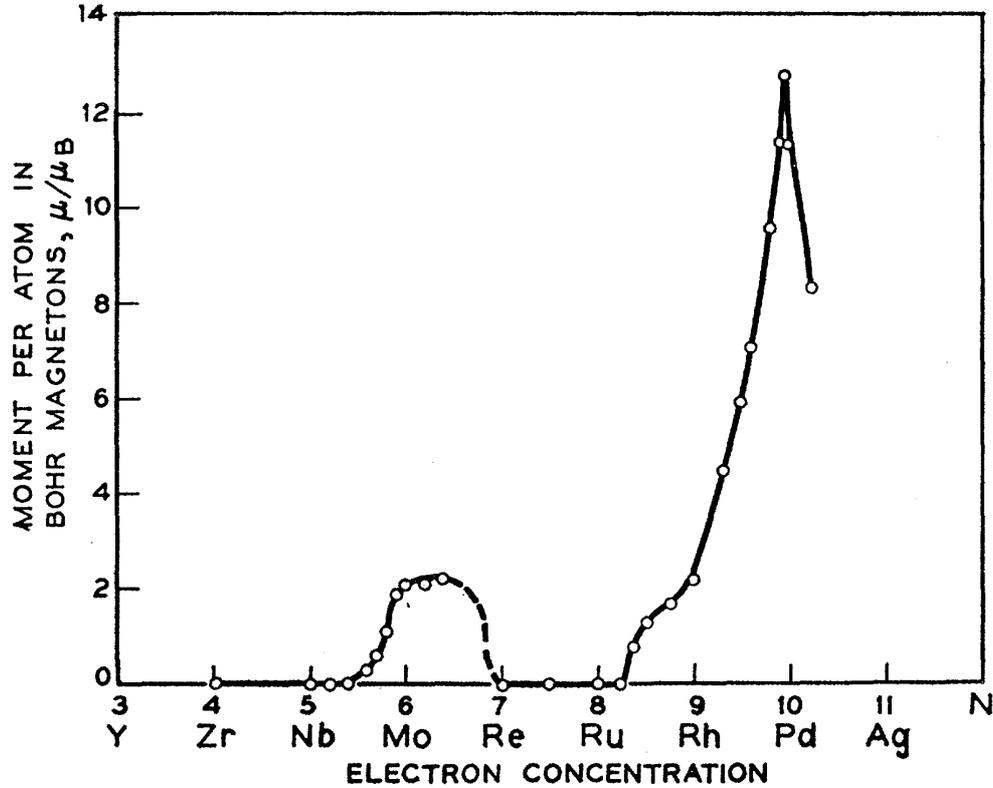


Figura 1.1: Resultados experimentais obtidos por Clogston *et. al.*: momentos magnéticos, em magnetons de Bohr, de um átomo de ferro dissolvido em metais de transição e ligas diluídas, em função da concentração de elétrons.

e que podia ser ajustada por uma lei de Curie-Weiss da forma

$$\chi = \frac{\mu_{eff}^2}{3k(T - \Theta)}, \quad (1.1)$$

onde  $\mu_{eff}$  é o momento magnético efetivo e  $\Theta$  a temperatura de Curie, que independe da concentração de impurezas.

A formação de momentos magnéticos, neste tipo de sistemas, foi aceita durante muito tempo como fato experimental sem que se questionasse como e em que condições eles se formavam. Friedel e seus colaboradores [2] foram os primeiros a enfrentar o problema. Eles observaram que as bandas de condução dos metais eram tão largas que geralmente os níveis de energia das impurezas se encontravam em seu interior e, conseqüentemente, esses estados não podiam estar verdadeiramente localizados.

Para descrever estes sistemas, Friedel introduziu o conceito de estado virtual, *i.e.*, um estado construído a partir de estados de elétrons livres do contínuo. Tal estado não pode estar verdadeiramente localizado, pois tem uma largura  $\Delta$  e a partir de um tempo  $\tau_\Delta$  decai novamente em um estado do contínuo. A formação de momentos localizados se resolve, pela determinação das condições segundo os quais os estados virtuais para elétrons com “spin para cima” não serão equivalentes aos estados virtuais para elétrons com “spin para baixo”

$$\langle n_\sigma \rangle \neq \langle n_{\bar{\sigma}} \rangle, \quad (1.2)$$

e um momento magnético existirá no estado de impureza. 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). Se a susceptibilidade não depender da temperatura, não haverá formação de momento localizado.

Ligas com impurezas diluídas que apresentam formação de momentos locais, também apresentam um mínimo na resistividade elétrica a baixas temperaturas, que aumenta com o decréscimo da temperatura segundo  $\ln(T)$  (veja Franck [4]). Kondo [5] foi o primeiro a associar os momentos magnéticos das impurezas com o mínimo na resistividade dessas ligas. A partir da teoria de perturbação em 2ª ordem, na aproximação de Born, calculou a resistividade elétrica produzida pelo espalhamento de “spin-flip” de um elétron de condução por um momento localizado e obteve um resultado proporcional a  $J^3 \ln(T)$ , onde  $J$  é a integral de troca e assume valores positivos para acoplamentos ferromagnéticos e valores negativos para acoplamentos antiferromagnéticos. Quando  $J$  é negativo (acoplamento antiferromagnético) e a temperatura está abaixo de uma certa temperatura característica  $T_K$ , conhecida como temperatura de Kondo, este termo cresce e diverge para  $T = 0$ . Esta divergência não corresponde a um resultado físico, sendo apenas um indício de que abaixo da temperatura Kondo não é mais válida a teoria de perturbações. Os resultados

experimentais [6] indicam que a medida que a temperatura vai a zero, o crescimento da resistividade tende a saturar em um valor constante a  $T = 0$  [6, 7], como pode ser visto na Fig.(1.2) abaixo.

Abaixo da temperatura de Kondo, a impureza praticamente perde o seu momento

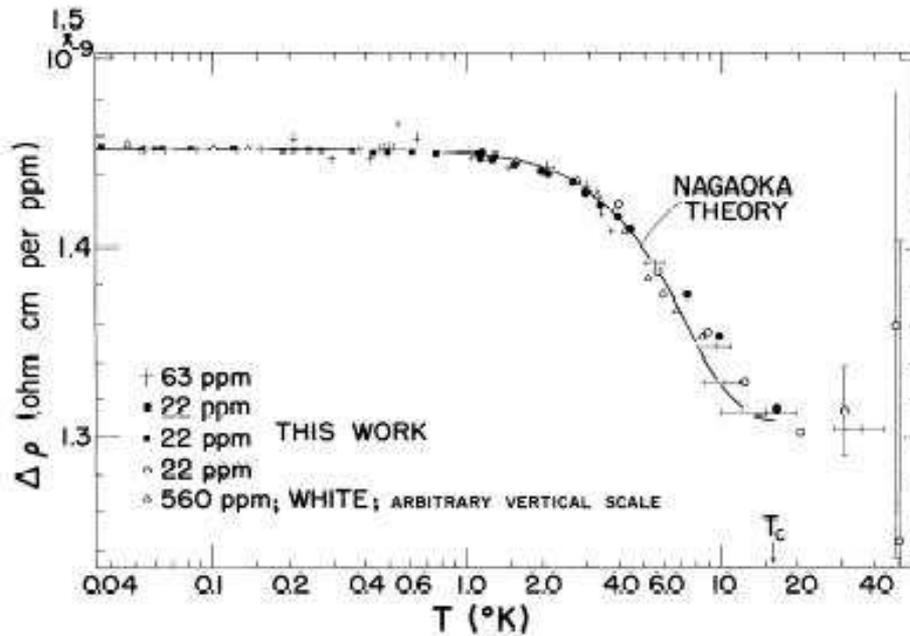


Figura 1.2: Resultados experimentais obtidos por Daybell: resistividade, a muito baixas temperaturas, de ligas diluídas de ferro em cobre. A contribuição dos fônons já foi subtraída.

magnético. Embora a susceptibilidade exceda em muito a contribuição tipo Pauli do metal hospedeiro, não existe magnetismo dependente da temperatura. Geralmente, se aceita que o efeito Kondo leva a uma compensação total do momento localizado pela nuvem de elétrons de condução que se polarizam em torno da impureza, sendo o acoplamento entre estes elétrons e a impureza antiferromagnético. Este efeito coletivo se destrói à medida que a temperatura aumenta. A transição de Kondo do regime paramagnético para o regime não magnético acontece gradualmente. É claro que tal transição de fase não pode ser abrupta, uma vez que a condensação em torno da impureza é localizada no espaço real, havendo poucos graus de liberdade envol-

vidos no processo. Deste modo, devemos esperar variações suaves nas propriedades destes sistemas quando a temperatura varia (veja Daybell [6]).

No regime Kondo, as impurezas se encontram tão afastadas entre si que sua interação é praticamente desprezível. 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. Nesta faixa de concentração, as impurezas interagem fortemente via interação *RKKY* (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).

## Capítulo 2

# Modelo Atômico

### 2.1 O modelo de Anderson periódico

A teoria de bandas usual é incapaz de descrever adequadamente os sistemas metálicos com impurezas magnéticas diluídas. Em geral, as energias dos estados localizados estão no interior da banda de condução do metal hospedeiro e a teoria de um elétron não é capaz de descrever a localização do estado da impureza. Para resolver essa dificuldade teórica, Anderson [8] supôs que a existência de momentos localizados em metais, se originava da correlação Coulombiana  $U$  entre elétrons das camadas internas da impureza magnética. Com esta hipótese central, propôs um modelo, chamado de modelo da impureza de Anderson (MIA) que incluía, desde o início, a correlação entre elétrons no mesmo sítio. O modelo de Anderson periódico (MAP) é uma generalização do MIA que considera uma distribuição periódica de níveis localizados, análogos ao sítio da impureza, o que é relevante na descrição dos sistemas de terras-raras e actínídeos, porque os elétrons  $f$  são extremamente localizados nesses íons, embora possamos aplicar este tratamento a sistemas com elétrons localizados de outros tipos, vamos nos referir a eles como sendo elétrons  $f$ . O modelo de Anderson periódico com energia de correlação  $U$  finita é expresso pelo

Hamiltoniano:

$$H = H_c + H_f + H_{cf} + H_{corr}, \quad (2.1)$$

onde  $H_c$  descreve a banda de condução e vem dado por

$$H_c = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} E_{\mathbf{k}, \sigma} c_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}, \sigma} \quad (2.2)$$

$H_f$  corresponde a energia não perturbada dos estados  $f$  localizados da impureza

$$H_f = \sum_{j, \sigma} E_{f, j\sigma} f_{j, \sigma}^\dagger f_{j, \sigma} \quad (2.3)$$

com  $f_{j, \sigma}^\dagger$  e  $f_{j, \sigma}$  representando operadores de criação e destruição de elétrons  $f$  nos estados localizados de Wannier no sítio  $j$ , com componente de spin  $\sigma$  e energia  $E_{f, j\sigma} = E_\sigma$  independente do sítio.  $H_{cf}$  é a energia de hibridização entre os elétrons da banda de condução e os estados localizados  $f$

$$H_{cf} = \sum_{j, \sigma, \mathbf{k}} \left( V_{j, \mathbf{k}, \sigma} f_{j, \sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}, \sigma} + V_{j, \mathbf{k}, \sigma}^* c_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger f_{j, \sigma} \right), \quad (2.4)$$

onde

$$V_{j, \mathbf{k}, \sigma} = \frac{1}{\sqrt{N_s}} V_\sigma(\mathbf{k}) \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_j), \quad (2.5)$$

sendo  $V_{j, \mathbf{k}, \sigma}$  independente do vetor de onda  $\mathbf{k}$  quando a hibridização é puramente local e  $N_s$  é o número de sítios do sistema.  $H_{corr}$  é a energia de repulsão Coulombiana entre dois elétrons  $f$  de spins opostos no mesmo sítio

$$H_{corr} = U \sum_j n_{j, \sigma} n_{j, \bar{\sigma}}, \quad (2.6)$$

onde

$$n_{j, \sigma} = f_{j, \sigma}^\dagger f_{j, \sigma} \quad (2.7)$$

é o número de elétrons  $f$  com componente de spin  $\sigma$  no sítio  $i$ . O símbolo  $\bar{\sigma}$  indica a componente de “spin” oposta a  $\sigma$ . A energia de correlação local  $U$  é dada por

$$U = \int |\Psi_f(1)|^2 \frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} |\Psi_f(2)|^2 d^3r_1 d^3r_2. \quad (2.8)$$

com  $\Psi_f$  sendo a função de onda eletrônica no sítio da impureza. A seguir vamos expressar o Hamiltoniano Eq. (2.1) em termos dos operadores  $X$  de Hubbard [9] de forma a eliminar a possibilidade de dupla ocupação do nível localizado da impureza, isso corresponde a fazer  $U \rightarrow \infty$ . De um modo geral, a parte do Hamiltoniano que depende somente do sítio  $j$ , e que inclui as correlações locais, pode ser facilmente diagonalizada. Considerando esses termos locais como Hamiltoniano não perturbado, teremos a seguinte solução do tipo atômico

$$H_o^j |j, \sigma \rangle = E_{j,\alpha} |j, \alpha \rangle, \quad (2.9)$$

com

$$H_j^o = H_j^c + H_j^f + H_j^{corr}. \quad (2.10)$$

Os operadores de Hubbard são definidos a partir das autofunções do Hamiltoniano atômico  $H_j^o$  do seguinte modo:

$$X_{j,\alpha\beta} = |j, \alpha \rangle \langle j, \beta|, \quad (2.11)$$

onde  $|j, \alpha \rangle$ , ( $j = 1, 2, \dots, p$  e  $\alpha$  é o spin) são os autoestados do Hamiltoniano de um sítio Eq. (2.10),  $N$  é o número total de sítios e  $p$  o número total de elétrons presente na auto-função  $|j, \alpha \rangle$ . O operador  $X_{j,\alpha\beta}$  destrói um átomo no estado  $|j, \beta \rangle$ , no sítio  $j$ , e o recria no estado  $|j, \alpha \rangle$  do mesmo sítio, enquanto todos os outros átomos da rede permanecem inalterados.

Da definição Eq. (2.11), os operadores de Hubbard associados ao mesmo sítio atômico satisfazem a seguinte regra de multiplicação

$$X_{j,\alpha\beta} \cdot X_{j,\gamma\epsilon} = \delta_{\beta,\gamma} X_{j,\alpha\epsilon}. \quad (2.12)$$

Projetando  $H_f$  e  $H_{cf}$  no subespaço de Hilbert correspondente ao Hamiltoniano de um sítio Eq. (2.10) se tem:

$$H_f = \sum_{j,\sigma} X_{j,0\sigma}^\dagger X_{j,0\sigma} = \sum_{j,\sigma} E_{i,\sigma} X_{j,\sigma\sigma}, \quad (2.13)$$

$$H_{cf} = \sum_{j,\mathbf{k},\sigma} \left( V_{j\mathbf{k}\sigma} X_{i,0\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k},\sigma} + V_{j,\mathbf{k},\sigma}^* c_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger X_{j,0\sigma} \right). \quad (2.14)$$

Das Eqs.(2.2), (2.13) e (2.14) se tem a o Hamiltoniano de Anderson no limite de correlação infinita ( $U \rightarrow \infty$ )

$$H = H_c + H_f + H_{cf} \quad (2.15)$$

$$H = \sum_{\mathbf{k},\sigma} E_{\mathbf{k},\sigma} c_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k},\sigma} + \sum_{j,\sigma} E_{j,\sigma} X_{j,\sigma\sigma} + \sum_{j,\mathbf{k},\sigma} \left( V_{j,\mathbf{k},\sigma} X_{j,0\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k},\sigma} + V_{j,\mathbf{k},\sigma}^* c_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger X_{j,0\sigma} \right). \quad (2.16)$$

que é o modelo de Anderson periódico, expresso em termos dos operadores de Hubbard para  $U \rightarrow \infty$ .

## 2.2 Solução atômica

Nesta seção iremos resolver o modelo de Anderson Eq. (2.16) no limite da banda de condução nula. Isso corresponde a eliminar do Hamiltoniano a contribuição de *hopping* (veja Alascio[10]). Iremos considerar a relação entre um dado estado da banda de condução  $\vec{k}$  e um estado localizado  $f$ . Nesse caso, a solução analítica do Hamiltoniano é conhecida [11]. No Hamiltoniano de Anderson, as possíveis ocupações da banda de condução são quatro ( $0, \uparrow, \downarrow, \uparrow\downarrow$ ), enquanto que nos sítios dos elétrons  $f$  teremos:  $(0, +\frac{1}{2}, -\frac{1}{2})$ , devido a restrição da dupla ocupação ( $U \rightarrow \infty$ ). Nesse caso, teremos um espaço de Fock com doze estados caracterizados por  $|m, \sigma\rangle$ , tal como indicado na Tabela 1.

| $ m, \sigma \rangle$                         | $E$                              | $n$ | $S_z$ |
|--|----------------------------------|-----|-------|
| $ 0, 0 \rangle$                              | 0                                | 0   | 0     |
| $ \frac{1}{2}, 0 \rangle$                    | $\varepsilon_f$                  | 1   | 1/2   |
| $ -\frac{1}{2}, 0 \rangle$                   | $\varepsilon_f$                  | 1   | -1/2  |
| $ 0, \uparrow \rangle$                       | $\varepsilon_q$                  | 1   | 1/2   |
| $ 0, \downarrow \rangle$                     | $\varepsilon_q$                  | 1   | -1/2  |
| $ \frac{1}{2}, \uparrow \rangle$             | $\varepsilon_f + \varepsilon_q$  | 2   | 1     |
| $ \frac{1}{2}, \downarrow \rangle$           | $\varepsilon_f + \varepsilon_q$  | 2   | 0     |
| $ -\frac{1}{2}, \uparrow \rangle$            | $\varepsilon_f + \varepsilon_q$  | 2   | 0     |
| $ -\frac{1}{2}, \downarrow \rangle$          | $\varepsilon_f + \varepsilon_q$  | 2   | -1    |
| $ 0, \uparrow \downarrow \rangle$            | $2\varepsilon_q$                 | 2   | 0     |
| $ \frac{1}{2}, \uparrow \downarrow \rangle$  | $\varepsilon_f + 2\varepsilon_q$ | 3   | 1/2   |
| $ -\frac{1}{2}, \uparrow \downarrow \rangle$ | $\varepsilon_f + 2\varepsilon_q$ | 3   | -1/2  |

Tabela 1: Estados da impureza de Anderson no limite  $2D = V = 0$ , onde  $E$  representa as energias,  $n$  é o número total de partículas e  $S_z$  corresponde a projeção do momento angular ao longo da direção  $z$ . Definimos  $\varepsilon_f = E_f - \mu$  e  $\varepsilon_q = E_k - \mu$

Na Tabela 2 Representamos os autoestados correspondentes as autoenergias do sistema que obtivemos calculando o valor esperado do Hamiltoniano da impureza de Anderson no limite de banda de condução nula  $2D = 0$ . Nesse caso consideramos a hibridização diferente de zero  $V \neq 0$ . Verificamos que o estado de menor energia do sistema é o  $|9\rangle$ . Este é um estado do tipo singleto, que está relacionado com o acoplamento antiferromagnético da ressonância eletrônica formada pelos elétrons de condução em torno do momento magnético da impureza.

| <i>Autoestados</i>   | $E_r, r = 1, \dots, 12$                                 | $n$ | $S$           | $S_z$          |
|--|---|-----|---------------|----------------|
| $ 1\rangle =  0, 0\rangle$   | 0   | 0   | 0             | 0              |
| $ 2\rangle = \cos\phi -\frac{1}{2}, 0\rangle - \sin\phi 0, \downarrow\rangle$  | $\frac{1}{2}(\varepsilon_f + \varepsilon_q - \Delta)$   | 1   | $\frac{1}{2}$ | $-\frac{1}{2}$ |
| $ 3\rangle = \cos\phi \frac{1}{2}, 0\rangle - \sin\phi 0, \uparrow\rangle$   | $\frac{1}{2}(\varepsilon_f + \varepsilon_q - \Delta)$   | 1   | $\frac{1}{2}$ | $+\frac{1}{2}$ |
| $ 4\rangle = \sin\phi -\frac{1}{2}, 0\rangle + \cos\phi 0, \downarrow\rangle$  | $\frac{1}{2}(\varepsilon_f + \varepsilon_q + \Delta)$   | 1   | $\frac{1}{2}$ | $-\frac{1}{2}$ |
| $ 5\rangle = \sin\phi \frac{1}{2}, 0\rangle + \cos\phi 0, \uparrow\rangle$   | $\frac{1}{2}(\varepsilon_f + \varepsilon_q + \Delta)$   | 1   | $\frac{1}{2}$ | $+\frac{1}{2}$ |
| $ 6\rangle =  -\frac{1}{2}, \downarrow\rangle$   | $\varepsilon_f + \varepsilon_q$                         | 2   | 1             | -1             |
| $ 7\rangle = 1/\sqrt{2}  \frac{1}{2}, \downarrow\rangle +  -\frac{1}{2}, \uparrow\rangle$  | $\varepsilon_f + \varepsilon_q$                         | 2   | 1             | 0              |
| $ 8\rangle =  \frac{1}{2}, \uparrow\rangle$  | $\varepsilon_f + \varepsilon_q$                         | 2   | 1             | +1             |
| $ 9\rangle = \frac{\cos\Lambda}{\sqrt{2}} \frac{1}{2}, \downarrow\rangle -  -\frac{1}{2}, \uparrow\rangle - \sin\Lambda 0, \uparrow\downarrow\rangle$  | $\frac{1}{2}(\varepsilon_f + 3\varepsilon_q - \Delta')$ | 2   | 0             | 0              |
| $ 10\rangle = \frac{\sin\Lambda}{\sqrt{2}} \frac{1}{2}, \downarrow\rangle -  -\frac{1}{2}, \uparrow\rangle + \cos\Lambda 0, \uparrow\downarrow\rangle$ | $\frac{1}{2}(\varepsilon_f + 3\varepsilon_q + \Delta')$ | 2   | 0             | 0              |
| $ 11\rangle =  -\frac{1}{2}, \uparrow\downarrow\rangle$  | $\varepsilon_f + 2\varepsilon_q$                        | 3   | $\frac{1}{2}$ | $-\frac{1}{2}$ |
| $ 12\rangle =  \frac{1}{2}, \uparrow\downarrow\rangle$   | $\varepsilon_f + 2\varepsilon_q$                        | 3   | $\frac{1}{2}$ | $+\frac{1}{2}$ |

Tabela 2: Autoenergias e autoestados para o MAP no limite de largura da banda de condução nula e hibridização diferente de zero ( $V \neq 0$ ),  $n$  é o número total de partículas e  $S$  e  $S_z$  correspondem ao momento angular total e a projeção do momento angular ao longo da direção  $z$ . Onde

$$\Delta = ((\varepsilon_q - \varepsilon_f)^2 + 4V^2)^{1/2}, \quad \Delta' = ((\varepsilon_q - \varepsilon_f)^2 + 8V^2)^{1/2},$$

$$\text{tg}\phi = 2V/(\varepsilon_q - \varepsilon_f + \Delta) \text{ e } \text{tg}\Lambda = 2\sqrt{2}V/(\varepsilon_q - \varepsilon_f + \Delta').$$

Para se obter a função de Green atômica, usamos a equação de Zubarev [12]

$$G_{\omega}^{at}(\omega) = e^{\beta\Omega} \sum_n \sum_{jj'} (e^{-\beta E_{nj}} + e^{-\beta E_{n-1j'}}) \frac{|\langle n-1, j' | X_{\mu} | nj \rangle|^2}{\omega - (E_{nj} - E_{n-1j'})}, \quad (2.17)$$

onde  $\Omega$  é o potencial termodinâmico e os autovalores  $E_{nj}$  e autovetores  $|nj\rangle$  correspondem à solução completa do Hamiltoniano. O resultado final segue abaixo

$$G^{at}(\omega) = e^{\beta\Omega} \sum_{i=1}^8 \frac{m_i}{\omega - u_i}, \quad (2.18)$$

Os pólos da função de Green são dados por

$$u_1 = E_3 - E_1 = E_8 - E_5 = E_7 - E_4 \frac{1}{2} (\varepsilon_q + \varepsilon_f - \Delta) \quad (2.19)$$

$$u_2 = E_5 - E_1 = E_8 - E_3 = E_7 - E_2 \frac{1}{2} (\varepsilon_q + \varepsilon_f + \Delta) \quad (2.20)$$

$$u_3 = E_{12} - E_{10} = \frac{1}{2} (\varepsilon_q + \varepsilon_f - \Delta') \quad (2.21)$$

$$u_4 = E_{12} - E_9 = \frac{1}{2} (\varepsilon_q + \varepsilon_f + \Delta') \quad (2.22)$$

$$u_5 = E_9 - E_2 = \varepsilon_q - \frac{1}{2} (\Delta' - \Delta) \quad (2.23)$$

$$u_6 = E_{10} - E_2 = \varepsilon_q + \frac{1}{2} (\Delta' + \Delta) \quad (2.24)$$

$$u_7 = E_9 - E_4 = \varepsilon_q - \frac{1}{2} (\Delta' + \Delta) \quad (2.25)$$

$$u_8 = E_{10} - E_4 = \varepsilon_q + \frac{1}{2} (\Delta' - \Delta) \quad (2.26)$$

e os resíduos são

$$m_1 = \cos^2 \phi [1 + e^{-\frac{1}{2}\beta(\varepsilon_f + \varepsilon_q - \Delta)} + \frac{3}{2} e^{-\frac{1}{2}\beta(\varepsilon_f + \varepsilon_q + \Delta)} + \frac{3}{2} e^{-\beta(\varepsilon_f + \varepsilon_q)}] \quad (2.27)$$

$$m_2 = \sin^2 \phi [1 + e^{-\frac{1}{2}\beta(\varepsilon_f + \varepsilon_q + \Delta)} + \frac{3}{2} e^{-\frac{1}{2}\beta(\varepsilon_f + \varepsilon_q - \Delta)} + \frac{3}{2} e^{-\beta(\varepsilon_f + \varepsilon_q)}] \quad (2.28)$$

$$m_3 = \cos^2 \Lambda [e^{-\frac{1}{2}\beta(\varepsilon_f + 3\varepsilon_q + \Delta')} + e^{-\frac{1}{2}\beta(\varepsilon_f + 2\varepsilon_q)}] \quad (2.29)$$

$$m_4 = \sin^2 \Lambda [e^{-\frac{1}{2}\beta(\varepsilon_f + 3\varepsilon_q - \Delta')} + e^{-\frac{1}{2}\beta(\varepsilon_f + 2\varepsilon_q)}] \quad (2.30)$$

$$m_5 = \frac{1}{2} \sin^2 \phi \cos^2 \Lambda [e^{-\frac{1}{2}\beta(\varepsilon_f + \varepsilon_q - \Delta)} + e^{-\frac{1}{2}\beta(\varepsilon_f + 3\varepsilon_q - \Delta')}] \quad (2.31)$$

$$m_6 = \frac{1}{2} \sin^2 \phi \sin^2 \Lambda [e^{-\frac{1}{2}\beta(\varepsilon_f + \varepsilon_q - \Delta)} + e^{-\frac{1}{2}\beta(\varepsilon_f + 3\varepsilon_q + \Delta')}] \quad (2.32)$$

$$m_7 = \frac{1}{2} \cos^2 \phi \cos^2 \Lambda [e^{-\frac{1}{2}\beta(\varepsilon_f + \varepsilon_q + \Delta)} + e^{-\frac{1}{2}\beta(\varepsilon_f + 3\varepsilon_q - \Delta')}] \quad (2.33)$$

$$m_8 = \frac{1}{2} \cos^2 \phi \sin^2 \Lambda [e^{-\frac{1}{2}\beta(\varepsilon_f + \varepsilon_q + \Delta)} + e^{-\frac{1}{2}\beta(\varepsilon_f + 3\varepsilon_q + \Delta')}] \quad (2.34)$$

Note que existem somente oito  $u_i$  para os elétrons  $f$ , pois algumas transições possuem o mesmo  $u_i$  e algumas outras se anulam. Cada  $u_i$  corresponde as linhas identificadas com o índice  $i$  que aparecem ligando os níveis da Fig.(2.1). As transições indicadas por linhas pontilhadas tem resíduo nulo quando a hibridização se anula ( $V = 0$ ).

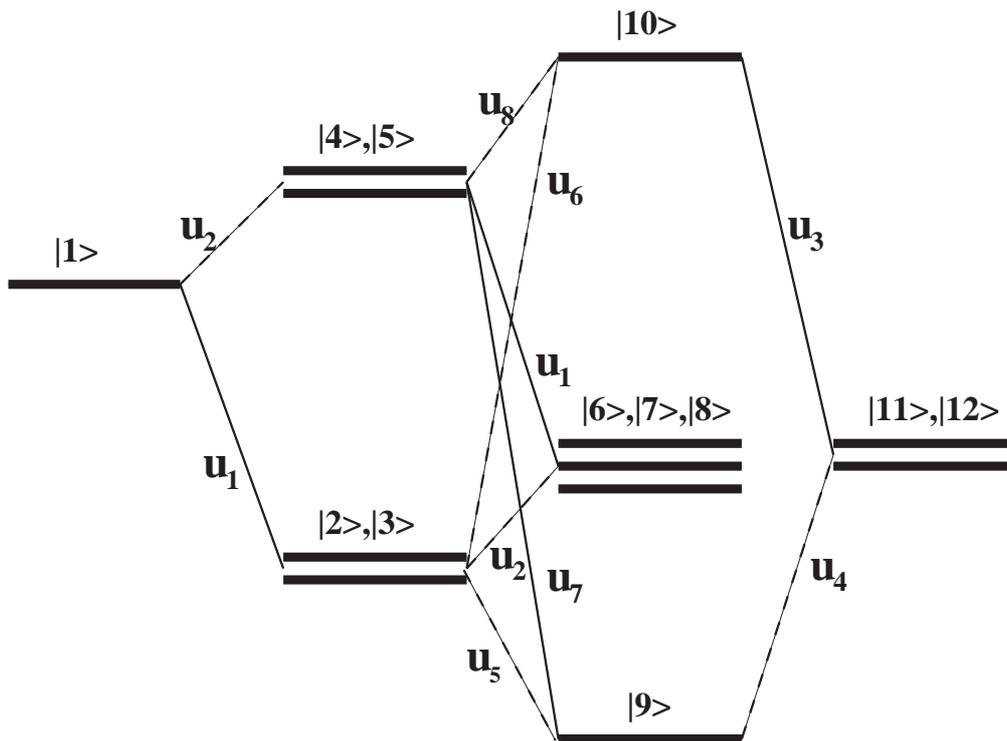


Figura 2.1: Energias  $\varepsilon_{n,r} = E_{n,r} - n\mu$  dos doze autoestados  $|n, r\rangle$  do limite atômico. Os autoestados correspondentes aos diferentes números de ocupação  $n = 0, 1, 2, 3$  estão desenhados em colunas diferentes. O índice  $r$  que caracteriza os estados está escrito acima dos níveis correspondentes e as linhas que ligam os diferentes níveis estão identificadas pelos números  $i$ , mostrando as possíveis transições  $u_i$  que contribuem para a função de Green.

### 2.3 O modelo atômico para a impureza de Anderson

O Hamiltoniano para a impureza de Anderson com repulsão Coulombiana infinita ( $U = \infty$ ) é dado por

$$H = \sum_{\mathbf{k},\sigma} E_{\mathbf{k},\sigma} c_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k},\sigma} + \sum_{\sigma} E_{f,\sigma} X_{f,\sigma\sigma} + V \sum_{\mathbf{k},\sigma} \left( X_{f,0\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k},\sigma} + c_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger X_{f,0\sigma} \right), \quad (2.35)$$

onde o primeiro termo representa os elétrons de condução ( $c$ -elétrons), o segundo descreve a impureza de Anderson caracterizado pelo nível localizado  $f$  com energia  $E_{f,\sigma}$  (a letra  $f$  representa o nível localizado da impureza) e o último termo corresponde a interação entre os elétrons  $c$  e a impureza que se conectam através de uma constante de hibridização  $V$ . Foram usados os operadores de Hubbard [9, 27] para eliminar o estado de dupla ocupação  $|f, 2\rangle$ , do estado local da impureza, e que satisfaz a seguinte relação

$$X_{f,00} + X_{f,\sigma\sigma} + X_{f,\bar{\sigma}\bar{\sigma}} = I, \quad (2.36)$$

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 completeza

$$n_{f,0} + n_{f,\sigma} + n_{f,\bar{\sigma}} = 1 \quad (2.37)$$

onde

$$n_{f,\sigma} = -\frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega n_F(\omega) \text{Im} G_{ff,\sigma}(\omega). \quad (2.38)$$

e

$$n_{f,0} = -\frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega (1 - n_F(\omega)) \text{Im} G_{ff,\sigma}(\omega). \quad (2.39)$$

Para obter a função de Green 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.[13], dentro da aproximação da cadeia, mas considerando todos os

possíveis cumulantes da expansão, como foi feito por Foglio e Figueira [14] 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. (2.16) ( $M_{2,\sigma}^0(z) = -D_\sigma^0/(z - \varepsilon_f)$ ) pelo cumulante efetivo  $M_{2,\sigma}^{eff}(z)$  em todos os vértices de elétrons  $f$  da cadeia de diagramas [13]. Assim, a função de Green exata para os elétrons  $f$  pode ser escrita como

$$G_{ff,\sigma}(z) = \frac{M_{2,\sigma}^{eff}(z)}{1 - M_{2,\sigma}^{eff}(z) |V|^2 \sum_{\mathbf{k}} G_{c,\sigma}^o(\mathbf{k}, z)}, \quad (2.40)$$

onde podemos escrever a FG dos elétrons da banda de condução como  $G_{c,\sigma}^o(\mathbf{k}, z) = -1/(z - \varepsilon(\mathbf{k}))$ . A solução exata da função de Green atômica já foi obtida na seção 2.2 e tem a mesma forma da Eq.(2.40).

$$G_{ff,\sigma}^{at}(z) = \frac{M_{2,\sigma}^{at}(z)}{1 - M_{2,\sigma}^{at}(z) |V|^2 \sum_{\mathbf{k}} G_{c,\sigma}^o(\mathbf{k}, z)}, \quad (2.41)$$

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

$$M_{2,\sigma}^{at}(z) = \frac{G_{ff,\sigma}^{at}(z)}{1 + G_{ff,\sigma}^{at}(z) |V|^2 \sum_{\mathbf{k}} G_{c,\sigma}^o(\mathbf{k}, z)}. \quad (2.42)$$

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  $\Delta^2$  [18], 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. (2.40) pelo valor aproximado de  $M_{2,\sigma}^{at}(z)$  dado pela Eq. (2.42) 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  $2D$

$$G_{ff,\sigma}^{imp}(z) = \frac{M_{2,\sigma}^{at}(z)}{1 + M_{2,\sigma}^{at}(z) \frac{|V|^2}{2D} \ln \left( \frac{z+D+\mu}{z-D+\mu} \right)}, \quad (2.43)$$

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

$$G_{cc,\sigma}^{imp}(z) = \frac{-1}{2D} \ln \left( \frac{z+D+\mu}{z-D+\mu} \right) - \frac{V^2}{D^2 - z^2} G_{ff,\sigma}^{imp}(z), \quad (2.44)$$

e

$$G_{fc,\sigma}^{imp}(z) = \frac{V}{2D} \ln \left( \frac{z+D+\mu}{z-D+\mu} \right) G_{ff,\sigma}^{imp}(z). \quad (2.45)$$

A diferença entre a FG exata e a aproximada é que diferentes energias  $E_q$  aparecem nos elétrons de condução dos propagadores efetivos  $M_{2,\sigma}^{eff}(z)$ , enquanto que essas energias são todas iguais à  $E_q$  no  $M_{2,\sigma}^{at}(z)$ .

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 FG's Eqs. (2.43-2.45) tenham um caráter bastante realista. Devemos ainda decidir que valor de  $E_q$  devemos considerar. Como a região mais importante dos elétrons de condução é o nível de Fermi, iremos usar a definição  $\xi = E_q \pm \delta E_q$ , permitindo pequenas mudanças em  $\delta E_q$  para ajustar os resultados de tal forma que a relação de completeza Eq. (2.37) seja satisfeita.

## 2.4 Cálculo da energia livre de Helmholtz

Uma forma muito conveniente para calcular o potencial termodinâmico é aplicando o método do parâmetro de integração  $\lambda$  [15, 16, 17]. Esse método introduz uma dependência em  $\lambda$  para o Hamiltoniano total do sistema.  $H(\lambda) = H_o + \lambda H_1$  através da constante de acoplamento  $\lambda$  (com  $0 \leq \lambda \leq 1$ ), onde  $H_1$  é o termo de

hibridização do Hamiltoniano Eq. (2.35) no nosso caso. Para cada  $\lambda$  existe um potencial termodinâmico associado  $\Omega(\lambda)$  que satisfaz:

$$\left(\frac{\partial\Omega}{\partial\lambda}\right)_{V_s, T, \mu} = \langle H_1(\lambda) \rangle_\lambda, \quad (2.46)$$

onde  $\langle A \rangle_\lambda$  é o ensemble médio de um operador  $A$  para um sistema com Hamiltoniano  $H(\lambda)$  com um dado valor de  $\mu, T$  e  $V_s$ . Integrando a Eq. (2.46) obtemos

$$\Omega = \Omega_o + \int_0^1 d\lambda \langle H_1(\lambda) \rangle_\lambda. \quad (2.47)$$

A energia livre de Helmholtz é dada por

$$F = \mu N_{tot} + \Omega, \quad (2.48)$$

onde  $\Omega$  é o potencial termodinâmico, porém como consideramos em todos os nossos calculos  $\mu = 0$ ,  $\Omega = F$  e  $\Omega_o = F_o$  e substituindo a Eq. (2.47) na Eq. (2.48) obtemos

$$F(\xi) = F_o + \int_0^1 d\lambda \langle H_1(\lambda, \xi) \rangle_\lambda, \quad (2.49)$$

onde  $F_o$  é a energia livre de Helmholtz para o sistema com  $\lambda = 0$  e o parâmetro  $\xi = E_q \pm \delta E_q$  é aplicado para ajustar a completiza

$$F_o = -\frac{2}{\beta} \sum_k \ln[1 + \exp(-\beta E_k)] - \frac{1}{\beta} \ln[1 + 2 \exp(-\beta E_f)]. \quad (2.50)$$

Podemos observar que  $F_o$  é calculado quando a hibridização  $V = 0$  e neste caso  $F_o$  não apresenta nenhuma dependência em  $\xi$  e conseqüentemente não contribui para o processo de minimização da energia livre de Helmholtz  $F(\xi)$ . Minimizamos a Eq. (2.50) calculando  $dF(\xi)/d\xi = 0$  de tal forma que escolhemos a solução de menor energia livre de Helmholtz, onde a completiza é satisfeita. Para calcular a integral na Eq.(2.47) usamos

$$\langle H_1 \rangle_\lambda = 2Re \left[ \sum_{\mathbf{k}\sigma} V_{\mathbf{k},\sigma}^* \langle c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger X_{0\sigma} \rangle_\lambda \right]. \quad (2.51)$$

A média  $\langle c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger X_{0\sigma} \rangle_\lambda$  é obtida da continuação analítica de Matsubara  $G_{\mathbf{k},\sigma}^{fc}(z_n, \lambda) \rightarrow \bar{G}_{\mathbf{k},\sigma}^{fc}(z, \lambda)$  nos semi-planos complexos inferiores e superiores, onde  $G_{\mathbf{k},\sigma}^{fc}(z_n, \lambda)$  é a FG

na Eq. (2.45) mas fazendo  $V_{\mathbf{k},\sigma} \rightarrow \lambda V_{\mathbf{k},\sigma}$ . Encontramos então

$$\begin{aligned} \langle c_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger X_{0\sigma} \rangle_\lambda &= \frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega n_F(\omega) \\ &\times \left\{ \overline{G}_{\mathbf{k}\sigma}^{fc}(\omega + i0; \lambda) - \overline{G}_{\mathbf{k}\sigma}^{fc}(\omega - i0; \lambda) \right\}, \end{aligned} \quad (2.52)$$

onde  $n_F(x) = 1/[1 + \exp(\beta x)]$  é a distribuição de Fermi-Dirac.

## 2.5 Análise dos resultados do modelo atômico

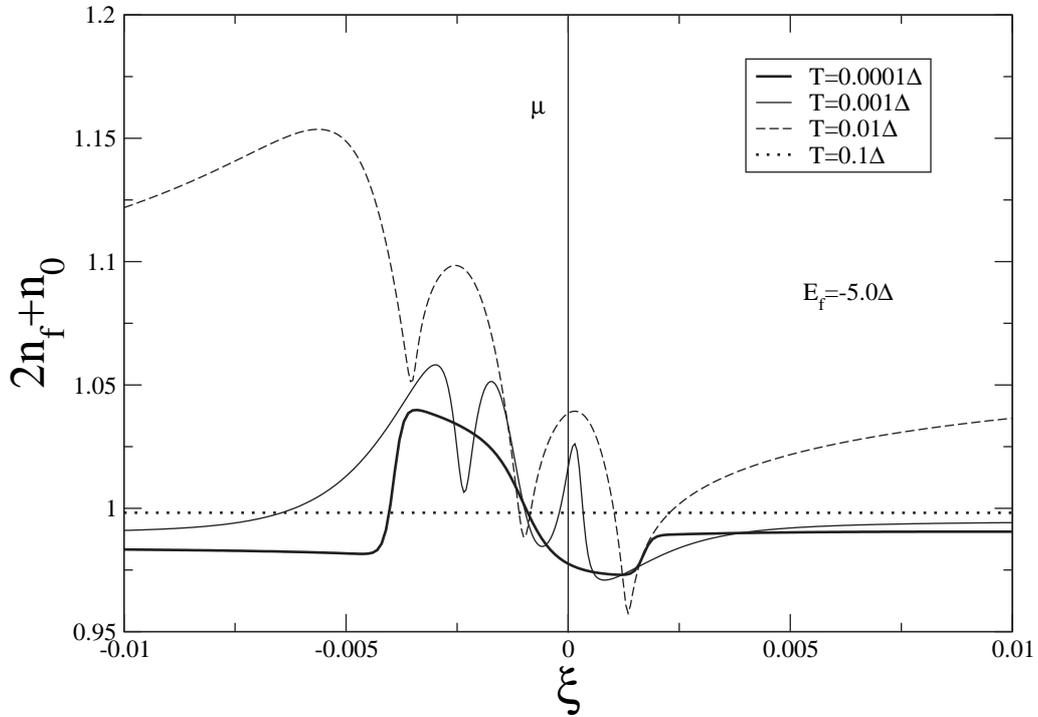


Figura 2.2: Completude como função de  $\xi$  para diferentes temperaturas.

Na Fig.(2.2) apresentamos a curva de completude quando variamos o parâmetro  $\xi$  em torno do potencial químico  $\mu$  para diferentes temperaturas. Quando a completude é satisfeita em mais de um ponto, escolhemos a solução que possui a menor energia livre de Helmholtz tal como indicada na Fig.(2.3). Para altas temperaturas, a completude não é mais satisfeita como mostrado na curva para  $T = 0.1\Delta$  então,

neste caso, procedemos da seguinte forma: partindo de uma temperatura muito baixa,  $T = 0.00001\Delta$ , aumentamos a temperatura, para um dado conjunto de parâmetros, procuramos a temperatura exata  $T_{perdida}$ , onde a completeza é perdida e usamos este valor particular de  $\xi$  para calcular todas as funções de Green para todas as temperaturas  $T > T_{perdida}$ . Fazemos isso para eliminar problemas de descontinuidade que aparecem em algumas propriedades tais como números de ocupação e condutância para altas temperaturas. Para temperaturas bem altas, a completeza é aproximadamente satisfeita, como pode ser visto na curva  $T = 0.1\Delta$  da Fig.(2.2).

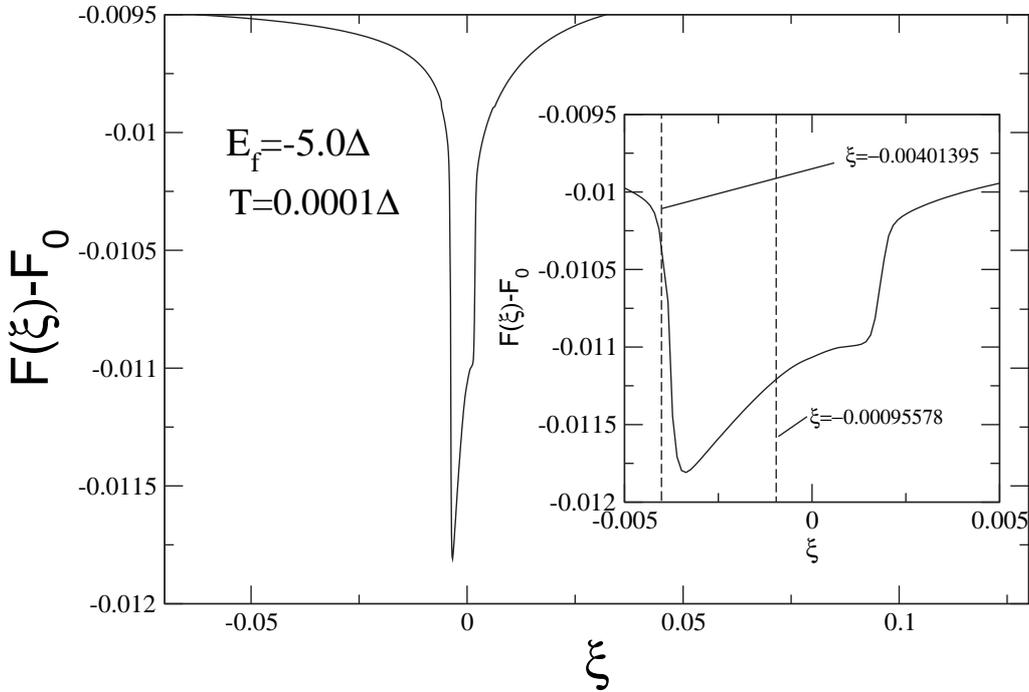


Figura 2.3: Energia livre de Helmholtz como função de  $\xi$  para um conjunto de parâmetros particular.

Na Fig.(2.3) mostramos o gráfico da energia livre de Helmholtz ( $F(\xi) - F_0$ ) para uma temperatura  $T = 0.0001\Delta$ . Podemos ver que ( $F(\xi) - F_0$ ) exibe um mínimo perto do potencial químico  $\mu = 0$ , porém, apenas dois pontos dessa curva satisfazem a completeza (veja Fig.(2.2)), escolhemos então aquela que possui a menor energia livre (escolhemos o pico correspondente a energia  $\xi = -0.00095578$ ) como pode ser

visto no detalhe da figura.

No conjunto de figuras Figs.(2.4-2.7) mostramos a evolução da formação do pico de Kondo com a diminuição da temperatura. Todas as figuras desse conjunto apresentam duas estruturas características do problema da impureza de Anderson. Localizada em  $E_f$  temos uma larga estrutura ressonante e no potencial químico, sempre localizada em  $\mu = 0$ , o pico de Kondo. No detalhe da Fig.(2.4), mostramos os três picos atômicos, a temperatura  $T = 0.01\Delta$ , que dão origem ao pico de Kondo. No detalhe da Fig.(2.5), para uma temperatura menor  $T = 0.001\Delta$ , podemos notar que os picos se tornam mais largos a medida que diminuimos a temperatura. Diminuindo mais a temperatura, para  $T = 0.0005\Delta$ , podemos ver no detalhe da Fig.(2.6) que o pico central praticamente domina as outras duas estruturas. Finalmente se diminuirmos mais ainda a temperatura para  $T = 0.0001\Delta$ , vemos no detalhe da Fig.(2.7) que o pico de Kondo é completamente formado.

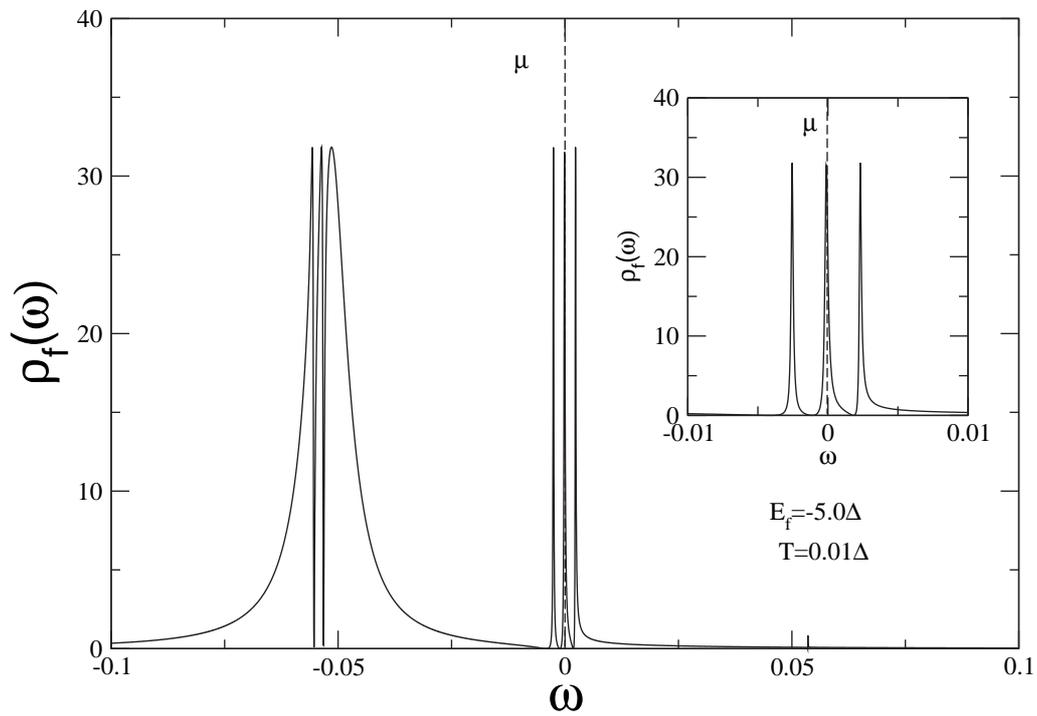


Figura 2.4: Densidade de estados para  $T = 0.01\Delta$  com  $E_f = -5.0\Delta$ . No detalhe da figura podemos observar as três estruturas, em  $T = 0.01\Delta$ , que irão originar o pico de Kondo.

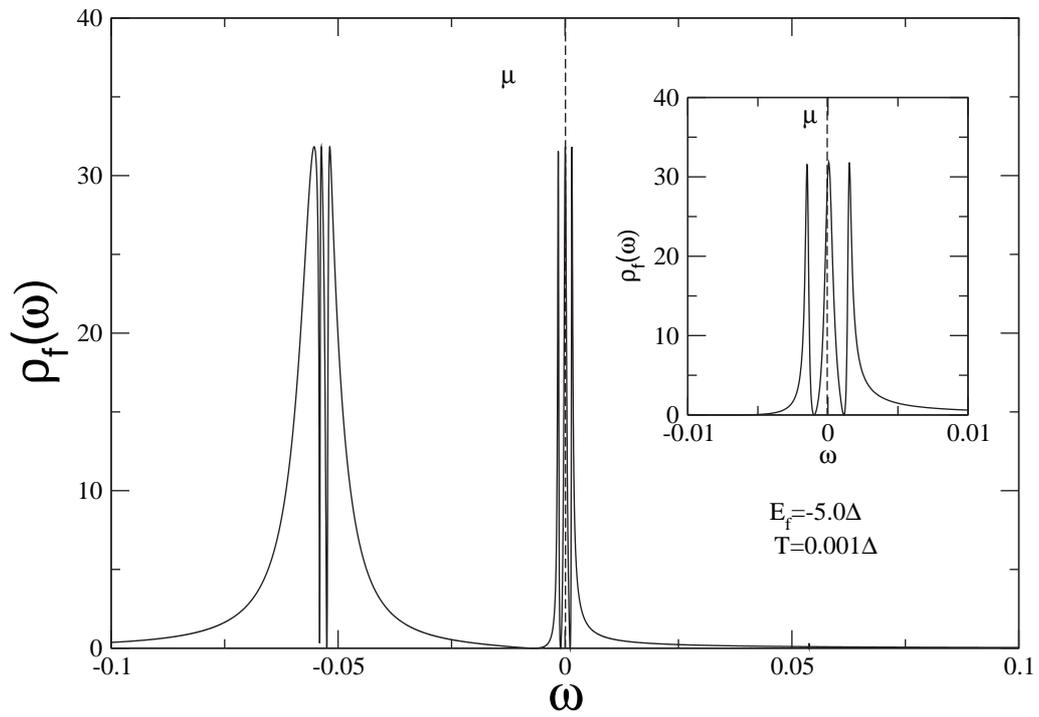


Figura 2.5: Densidade de estados para  $T = 0.001\Delta$  com  $E_f = -5.0\Delta$ . No detalhe da figura podemos observar as três estruturas que irão originar o pico de Kondo. Note que os picos se tornam mais largos com a diminuição da temperatura.

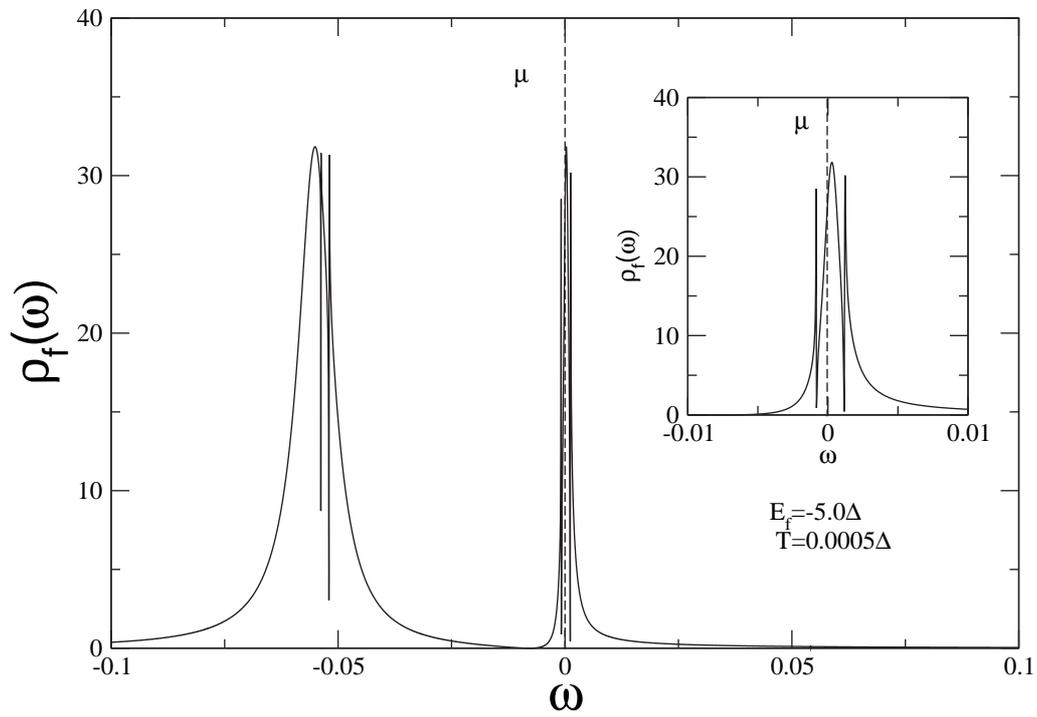


Figura 2.6: Densidade de estados para  $T = 0.0005\Delta$  com  $E_f = -5.0\Delta$ . No detalhe da figura podemos observar a formação do pico de Kondo. Nessa temperatura podemos ver que o pico central praticamente domina sobre as outras duas estruturas.

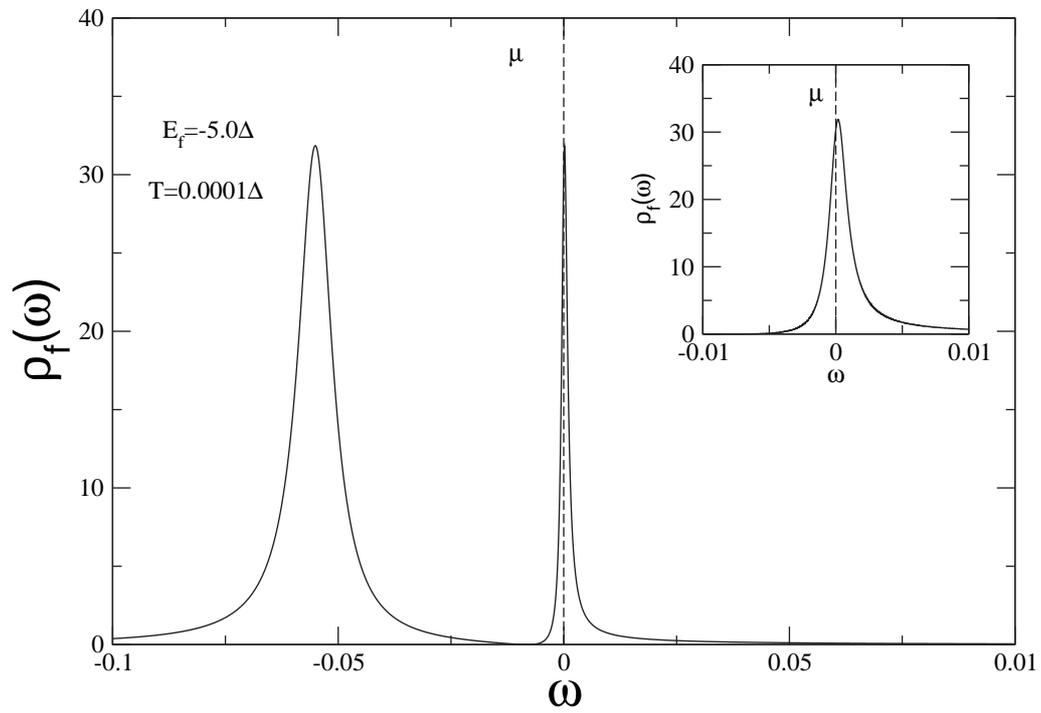


Figura 2.7: Densidade de estados para  $T = 0.0001\Delta$  com  $E_f = -5.0\Delta$ . No detalhe da figura podemos observar a formação do pico de Kondo. Nessa temperatura podemos ver que o pico de Kondo está completamente formado.

No conjunto das figuras (2.8-2.13) apresentamos a evolução da densidade de estados quando variamos a energia localizada  $E_f$ , passando pelos diferentes regimes da impureza de Anderson: Regime vazio, onde o nível localizado se encontra acima do nível de Fermi (Fig.(2.8)). Regime de valência intermediária, onde o nível localizado se encontra em torno do nível de Fermi e onde governa a flutuação de carga (Fig.(2.9)) e regime Kondo, onde o nível localizado se encontra bem abaixo do nível de Fermi e onde governa a flutuação de spin (Fig.(2.10)-Fig.(2.13)).

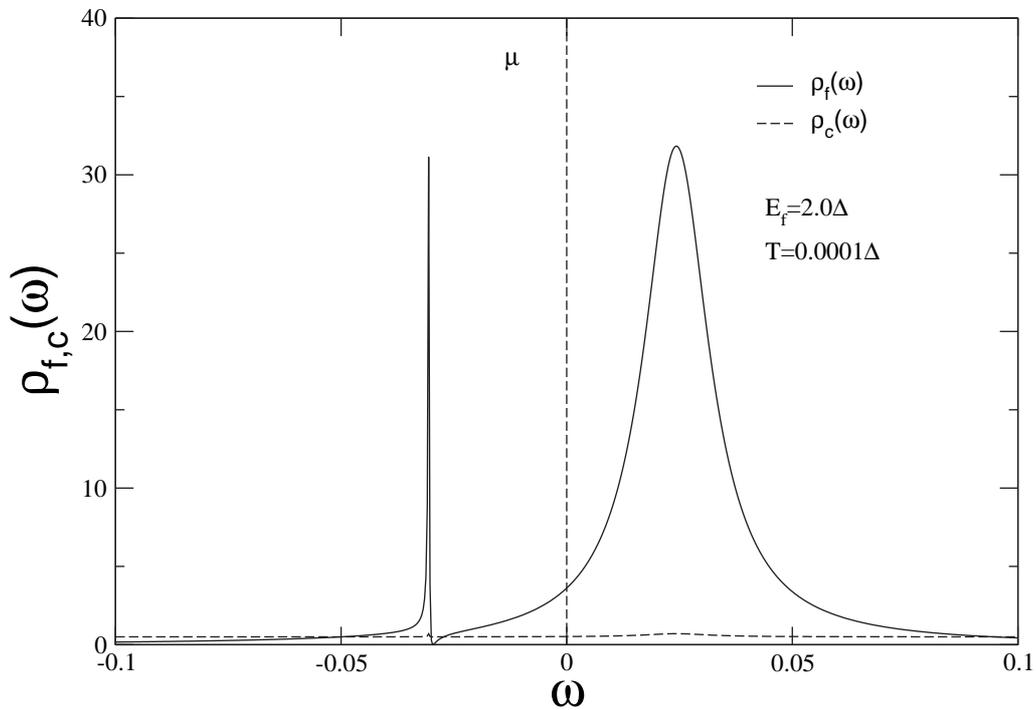


Figura 2.8: Densidade de estados para  $T = 0.0001\Delta$  com  $E_f = +2.0\Delta$ . Esse conjunto de parâmetros corresponde ao regime vazio.

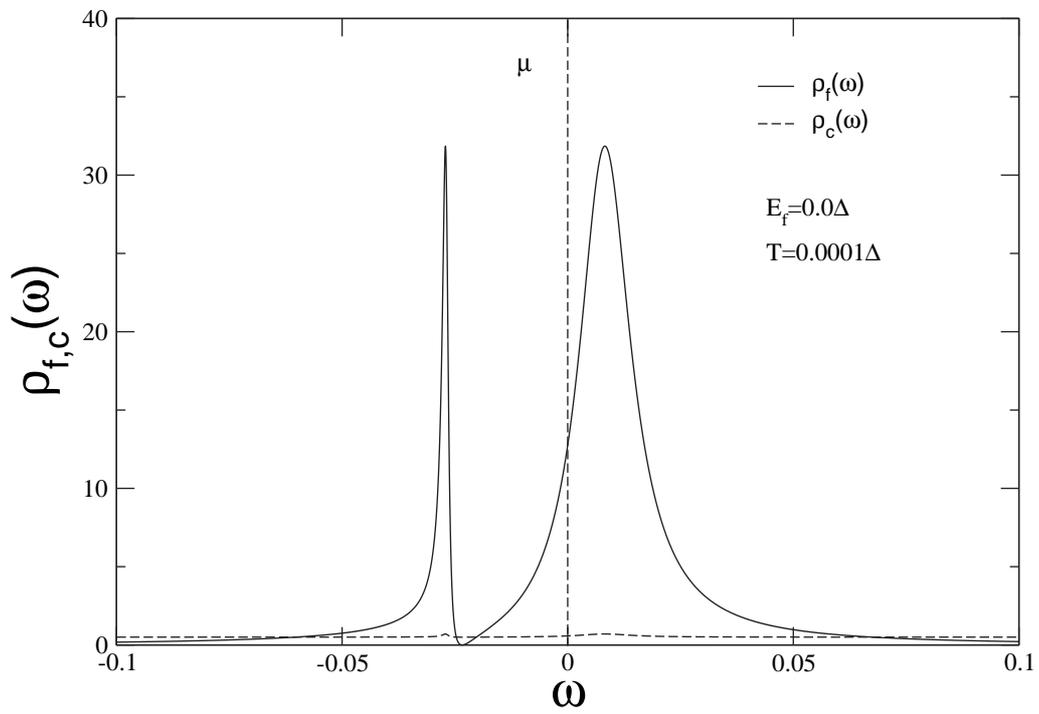


Figura 2.9: Densidade de estados para  $T = 0.0001\Delta$  com  $E_f = 0.0\Delta$ . Esse conjunto de parâmetros corresponde ao regime de velocidade intermediária.

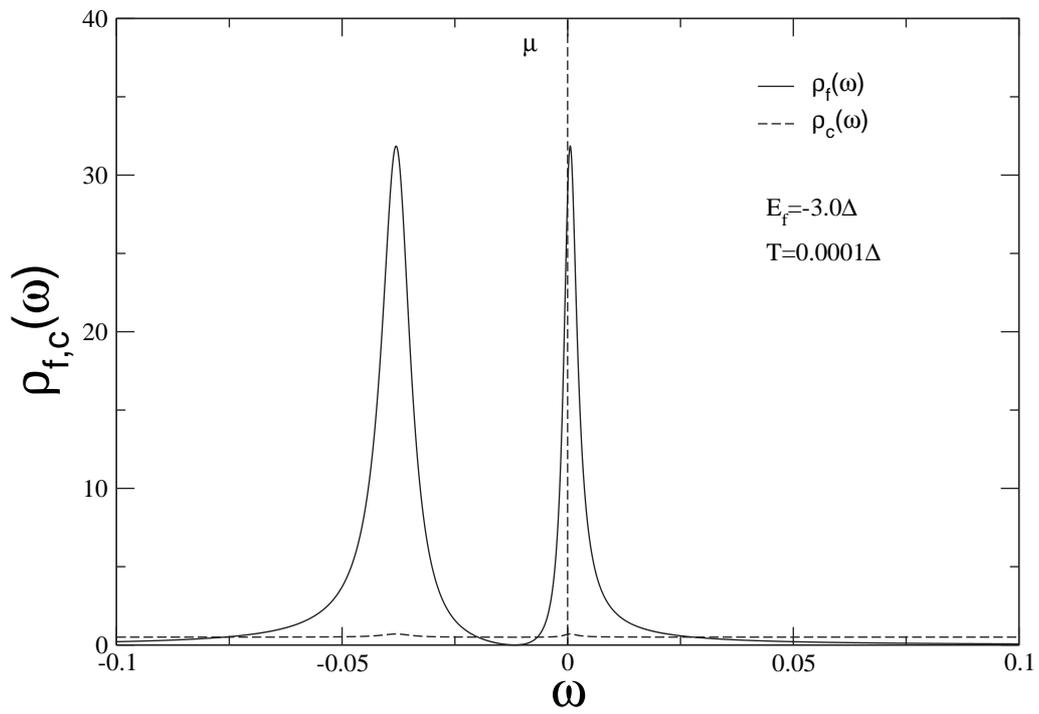


Figura 2.10: Densidade de estados para  $T = 0.0001\Delta$  com  $E_f = -3.0\Delta$ . Esse conjunto de parâmetros corresponde ao início do regime Kondo.

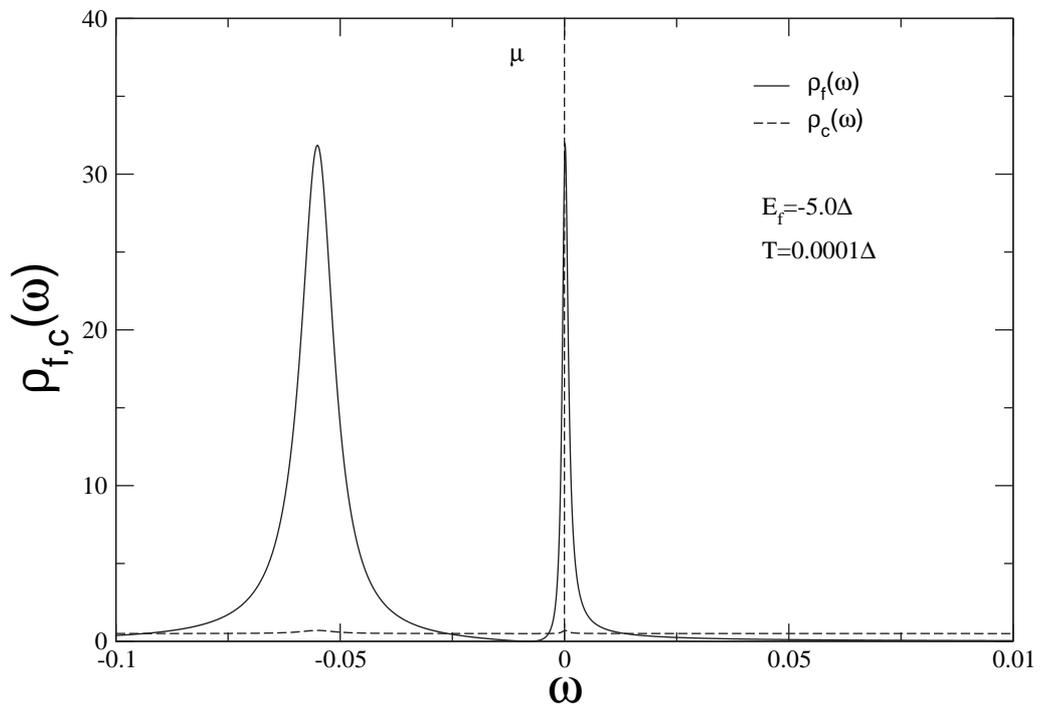


Figura 2.11: Densidade de estados para  $T = 0.0001\Delta$  com  $E_f = -5.0\Delta$ . Esse conjunto de parâmetros corresponde ao regime Kondo.

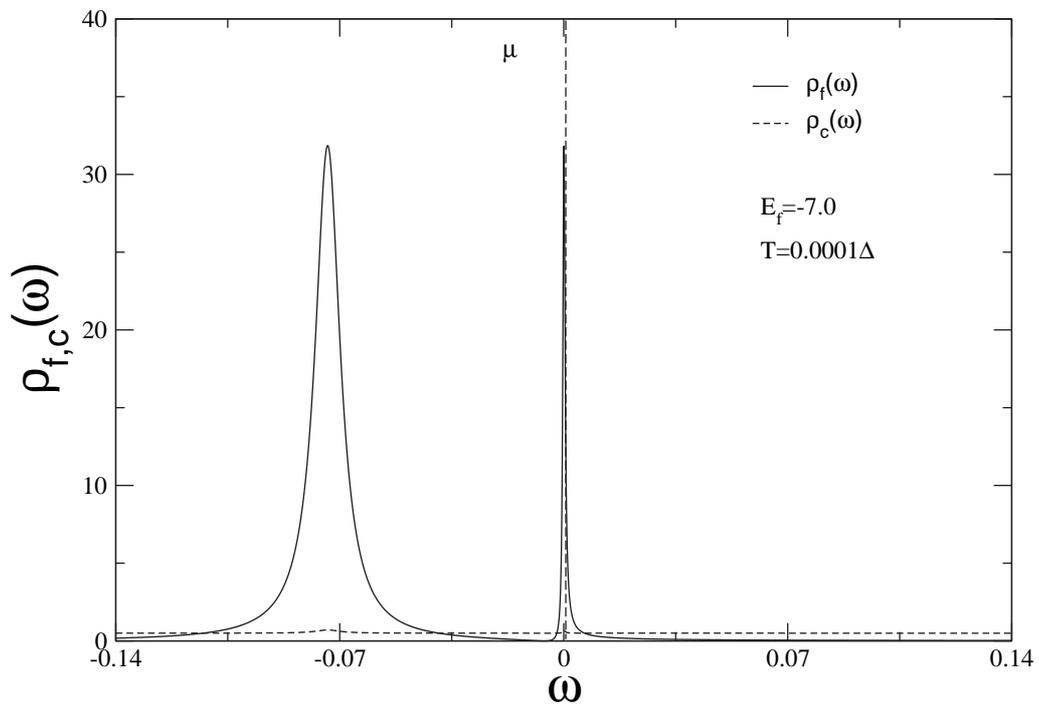


Figura 2.12: Densidade de estados para  $T = 0.0001\Delta$  com  $E_f = -7.0\Delta$ . Esse conjunto de parâmetros corresponde ao regime Kondo extremo.

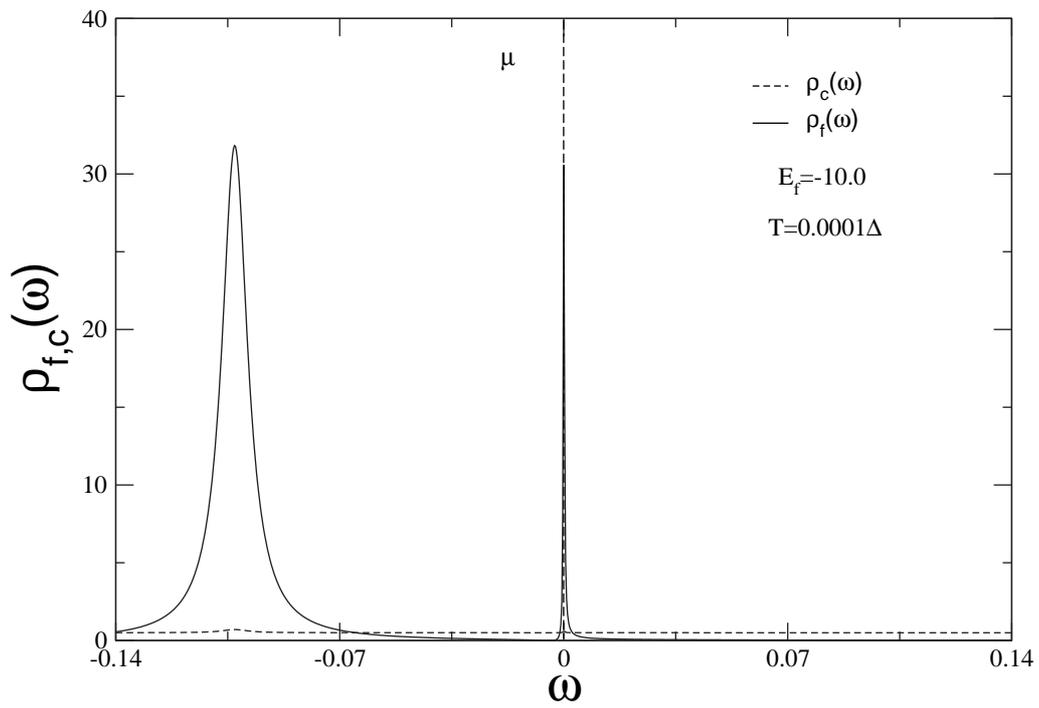


Figura 2.13: Densidade de estados para  $T = 0.0001\Delta$  com  $E_f = -10.0\Delta$ . Esse conjunto de parâmetros corresponde ao limite unitário do regime Kondo, onde  $n_f \simeq 1$  e o pico de Kondo está muito bem localizado sobre o potencial químico.

Na Fig.(2.14) resumimos o detalhe da formação do pico de Kondo presente nas figuras (2.8-2.13). Podemos notar que, quando o nível localizado  $E_f$  se move em direção ao limite Kondo unitário  $n_f \rightarrow 1$ , a largura do pico de Kondo diminui indicando uma diminuição da temperatura de Kondo.

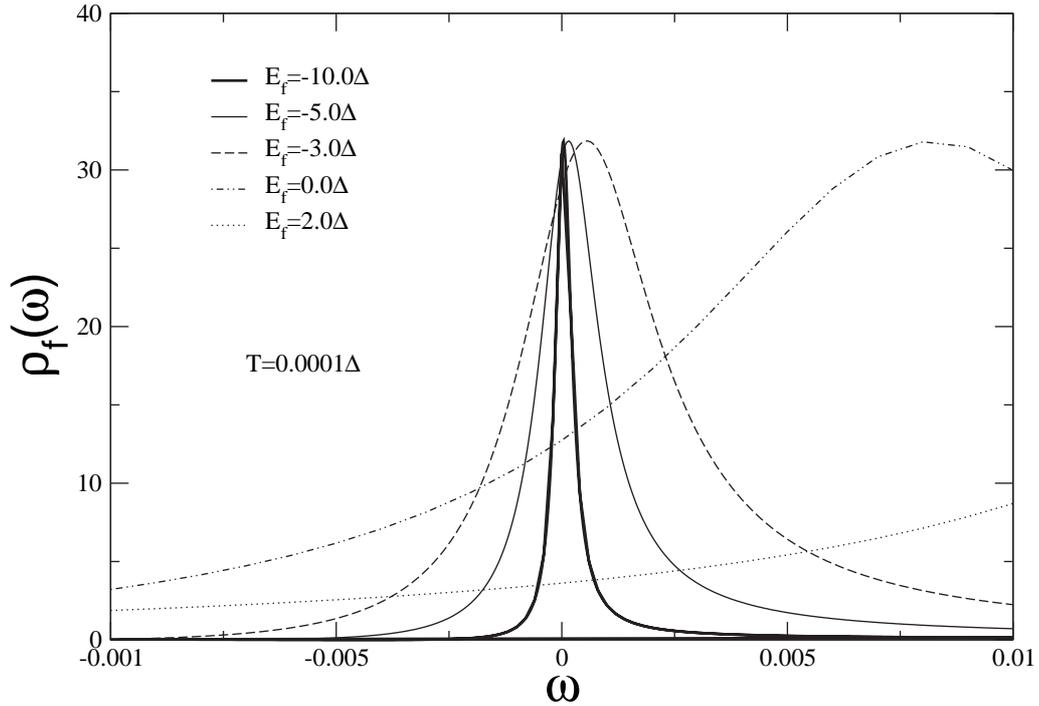


Figura 2.14: Densidade de estados para  $T = 0.0001\Delta$  e  $E_f = (+2.0; 0.0; -3.0; -5.0; -10.0)\Delta$ . Detalhe do pico de Kondo.

Na Fig.(2.15) apresentamos a densidade de estados, no potencial químico  $\mu$ , para  $T = 0.0001\Delta$ , como função de  $E_f$ . Comparamos o resultado do modelo atômico com o grupo de renormalização numérico (GRN), cujos resultados são considerados quase exatos, e com a Non-Crossing Approximation (NCA) (resultados obtidos por Costi *et.al.* [18]). Podemos ver que existe uma concordância muito boa entre os três métodos no regime Kondo. Para os regimes vazio e de valência intermediária, a concordância entre o modelo atômico e GRN é bem melhor que entre GRN e NCA, já que no método NCA o pico de Kondo sobrevive mesmo nos regimes de valência intermediária e vazio [18]. Devemos ainda observar que quando a completude não é

levada em conta no modelo atômico, os resultados são muito ruins, como podemos ver na curva com diamantes da Fig.(2.15).

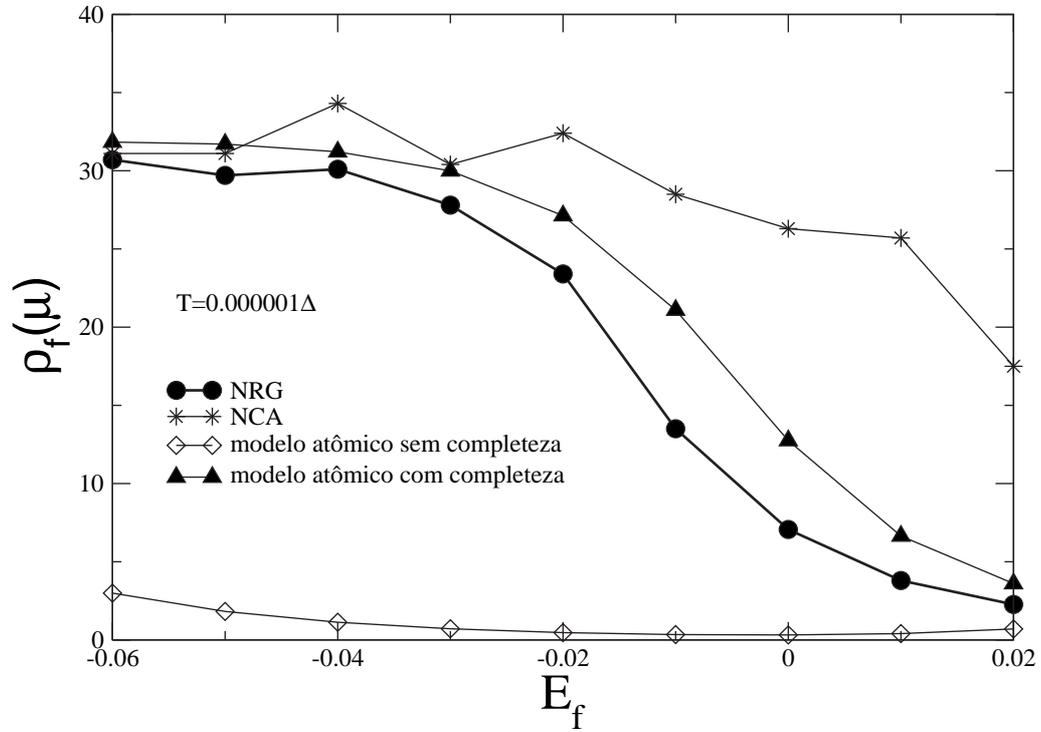


Figura 2.15: Densidade de estados no potencial químico para  $T = 0.0001\Delta$ , como função de  $E_f$ . Comparação entre GRN, NCA e modelo atômico com e sem completudeza.

Na Fig.(2.16) apresentamos a densidade de estados, no potencial químico  $\mu$ , para  $T = 0.000001\Delta$ , como função de  $E_f$ . Observe na figura que existe um excelente acordo entre o modelo atômico e a regra de soma de Friedel, que para o modelo da impureza de Anderson, pode ser escrita como [2, 22]

$$\rho_f(\mu) = \frac{\sin^2(\pi n_f)}{\Delta\pi}, \quad (2.53)$$

onde  $\rho_{f,\sigma}(\mu)$  é a densidade de estados do nível localizado, sobre o potencial químico.

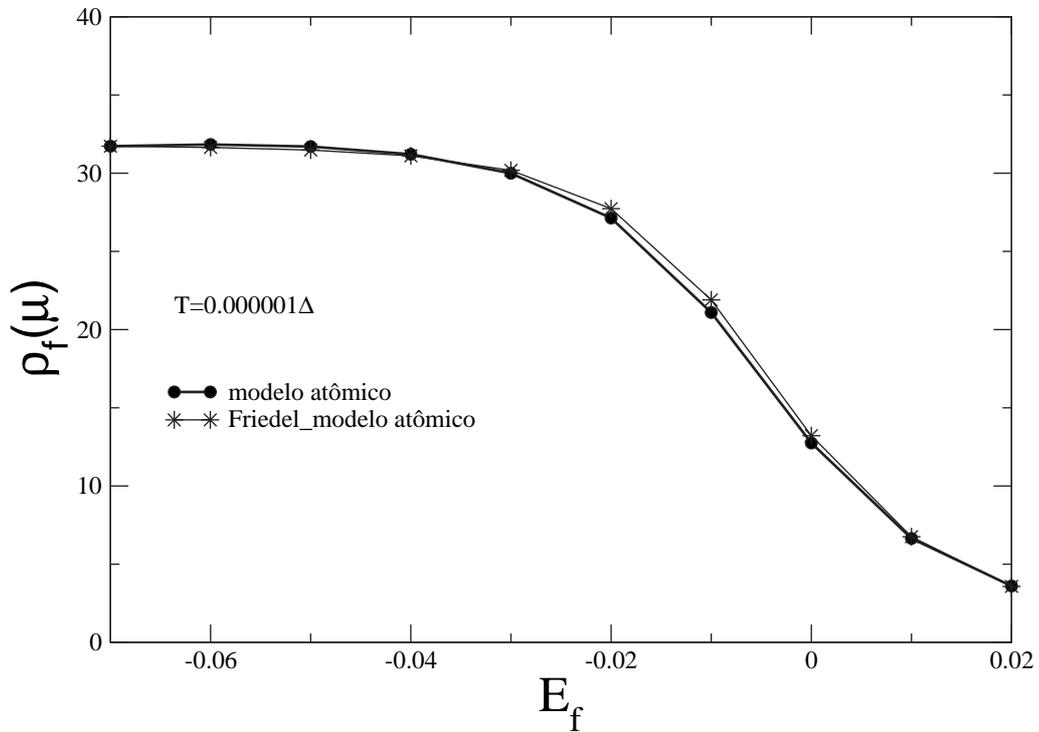


Figura 2.16: Densidade de estados no potencial químico para  $T = 0.000001\Delta$ , como função de  $E_f$ . Veja na figura o excelente acordo da regra de soma de Friedel com o modelo atômico.

Na Fig.(2.17) apresentamos os números de ocupação obtidos pelo modelo atômico e pelos métodos GRN e NCA (onde os resultados do GRN e NCA foram extraídos do trabalho do Costi et.al. [18]) como função de  $E_f$ . Apesar dos resultados para a densidade de estados calculados por NCA não serem confiáveis fora da região Kondo, a concordância entre GRN e NCA para os números de ocupação são excelentes. Ao passo que, a concordância entre o modelo atômico, GRN e NCA não é muito boa nos regimes vazio e de valência intermediária, tendo uma concordância muito melhor no regime Kondo.

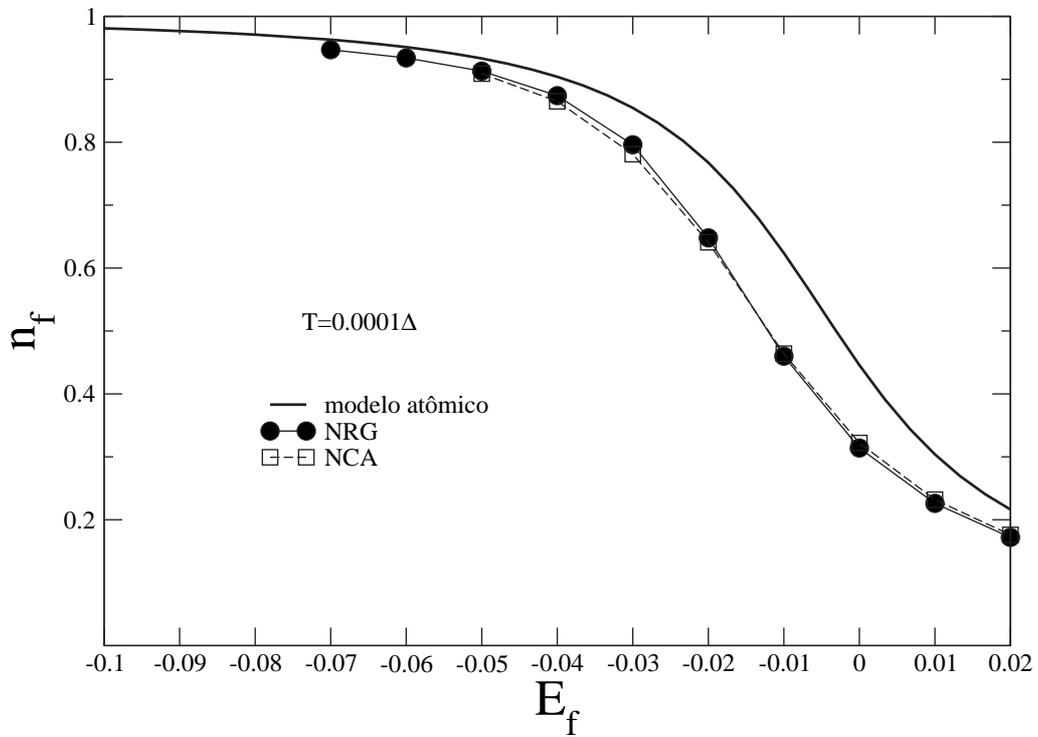


Figura 2.17: Números de ocupação como função de  $E_f$  para o modelo atômico, GRN e NCA.

Na Fig.(2.18) apresentamos o número de ocupação obtido pelo modelo atômico como função da temperatura  $T$ . Podemos ver na figura que o resultado tende ao limite termodinâmico correto de alta temperatura nessa aproximação ( $2/3$ )[18], ou seja, todos os estados para os elétrons  $f$  são equiprováveis ( $|0\rangle, |\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle$ ), lembrando que  $|\uparrow\rangle$  e  $|\downarrow\rangle$  são degenerados. Ao passo que, a baixas temperaturas, a medida que  $E_f$  fica mais negativo, o número de ocupação dos elétrons  $f$  tende para o limite unitário do regime Kondo,  $n \rightarrow 1$ .

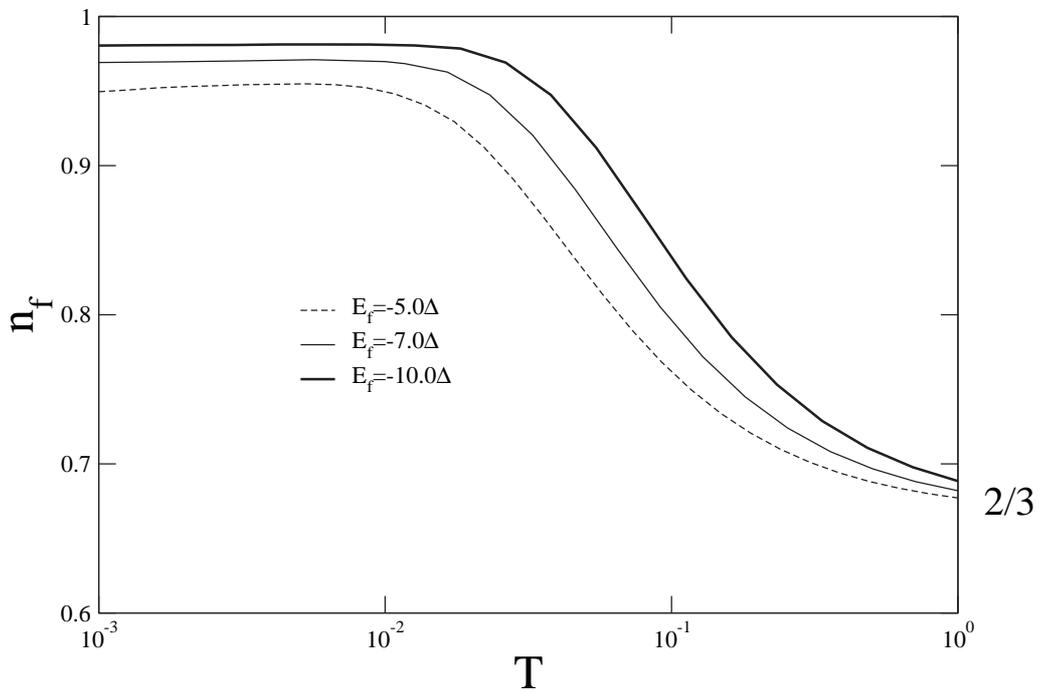


Figura 2.18: Números de ocupação para o modelo atômico como função de  $T$ .

Na Fig.(2.19) apresentamos a dependência da temperatura de Kondo, extraídas das curvas de densidade de estados da região Kondo. Consideramos  $T_K$  como a largura média do pico de Kondo (veja a figura 2.14), onde apresentamos o detalhe do pico de Kondo correspondendo aos diferentes regimes da impureza de Anderson. No detalhe da figura, apresentamos a dependência logarítmica de  $T_K$  com  $E_f$  na região Kondo. A expressão analítica para a temperatura de Kondo vem dada por

$$T_K = D \exp\left(-\frac{E_f}{V^2}\right), \quad (2.54)$$

onde  $D$  é a meia largura da banda de condução.

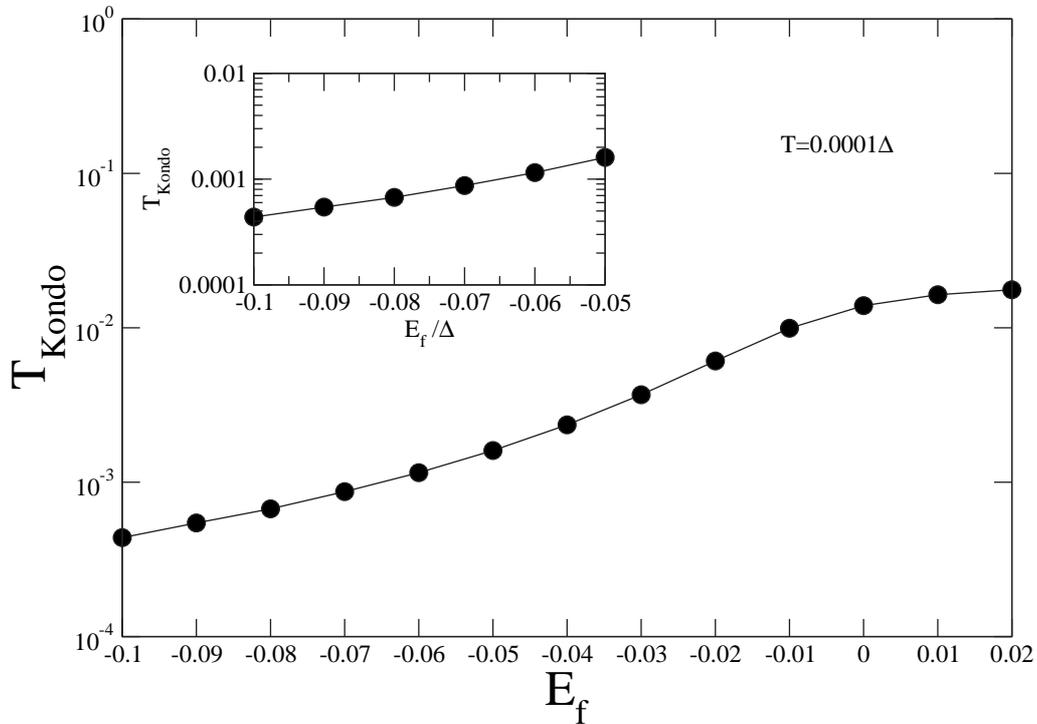


Figura 2.19: Comportamento logarítmico para a temperatura de Kondo.

Na Fig.(2.20) apresentamos a dependência da densidade de estados, no potencial químico, com a temperatura. Para temperaturas muito baixas, a densidade de estados no potencial químico tende a um valor constante. Conforme aumentamos a temperatura, a curva apresenta oscilações devido ao movimento do pico central no processo de separação dos três picos. A medida que se separam, os três picos oscilam em torno do potencial químico, resultando na oscilação vista no gráfico abaixo. Para uma certa temperatura, a densidade de estados cai bruscamente para zero indicando o desaparecimento dos picos no potencial químico e conseqüentemente a perda da solução Kondo.

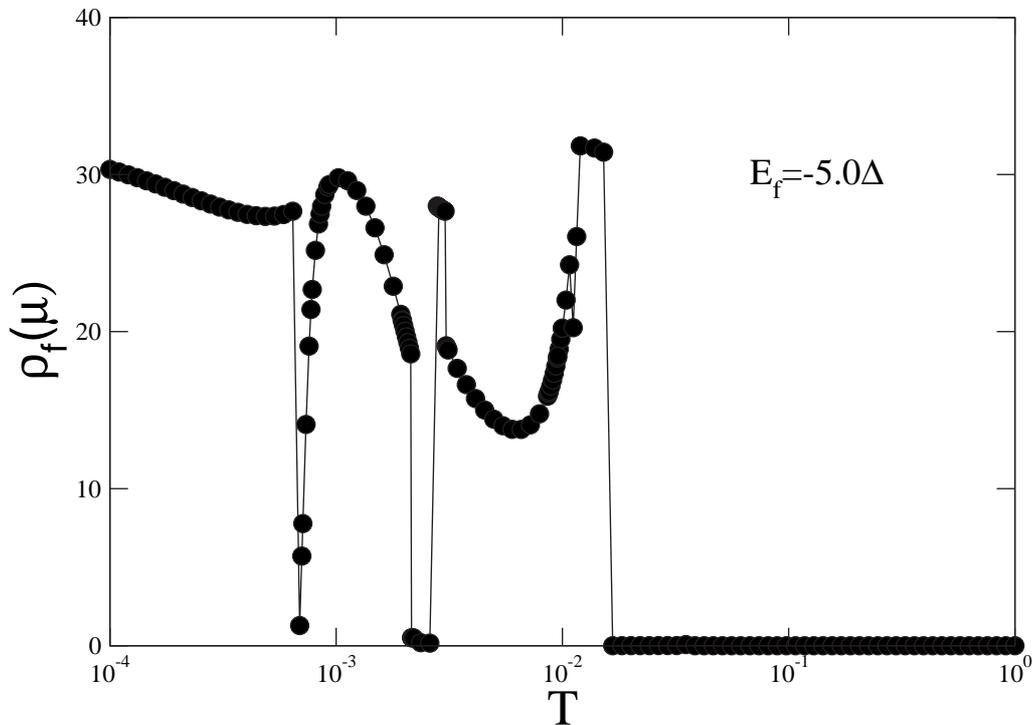


Figura 2.20: Densidade de estados para os elétrons  $f$  no potencial químico  $\mu$  como função da temperatura.

## Capítulo 3

# Pontos quânticos

Pontos quânticos (PQ) são nanodispositivos capazes de aprisionar um determinado número de elétrons em seus níveis discretos de energia. Os progressos recentes nas técnicas de fabricação de dispositivos eletrônicos permitiram a investigação do efeito Kondo por meio de pontos quânticos de forma bastante controlável [19]. Existe uma forte analogia entre os pontos quânticos e os átomos naturais. A carga e a energia estão quantizados e podem ser escolhidos ou alterados de forma bastante controlável. Desta forma, se torna muito interessante o estudo de propriedades de transporte nesse tipo de sistema, permitindo a observação e o estudo de diversos efeitos quânticos, tais como o efeito Fano, que aparece quando existe um processo de interferência quântica em um sistema composto de um espectro contínuo degenerado e um nível de energia discreto, e o efeito Kondo, cujos efeitos sobre as propriedades de transporte serão estudados neste trabalho.

O Efeito Kondo transforma de forma singular as propriedades de transporte desses sistemas dependendo de sua geometria. Experiências realizadas em um “transistor de 1 elétron” (SET), um nano-dispositivo que aprisiona uma pequena quantidade de elétrons bidimensionais no interior de um poço quântico de AsGa-AsGaAl, mostram que a ressonância Kondo, prevista teoricamente nestes sistemas [20] e experimentalmente medida [21], está presente simultaneamente com a ressonância Fano. Outra

configuração que tem sido muito estudada recentemente é a de um ponto quântico acoplado lateralmente a um fio quântico [22]. O sistema também exhibe a presença dos efeitos Kondo e Fano, e de forma similar aos problemas de impurezas, a interferência Kondo pode reduzir e eventualmente eliminar a transmissão de carga no sistema.

### 3.1 Condutância de um ponto quântico acoplado lateralmente a um canal balístico

Teoricamente, estes sistemas podem ser descritos pelo modelo da impureza de Anderson. Estruturas com PQs acoplados a um canal balístico (CB) por meio de contatos laterais, tem sido estudadas por meio de várias técnicas numéricas e diagramáticas [20, 23].

Nessa seção iremos aplicar o modelo atômico ao estudo de um ponto quântico acoplado lateralmente a um canal balístico. Esse sistema tem sido estudado do ponto de vista teórico, [22, 25] e foi recentemente observado experimentalmente [26]. Na Fig.(3.1) podemos ver uma representação esquematizada de um ponto quântico acoplado a um canal balístico. A baixas temperaturas e voltagem o transporte eletrônico é coerente e a condutância é calculada através da equação de Landauer [22]

$$G = \frac{2e^2}{\hbar} \int \left( -\frac{\partial n_F}{\partial \omega} \right) S(\omega) d\omega, \quad (3.1)$$

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

$$S(\omega) = \Gamma^2 |G_{00}^\sigma|^2, \quad (3.2)$$

onde  $\Gamma$  corresponde a uma constante de acoplamento que é proporcional à energia cinética dos elétrons no fio [25].  $G_{00}^\sigma$  pode ser calculada através da equação de Dyson

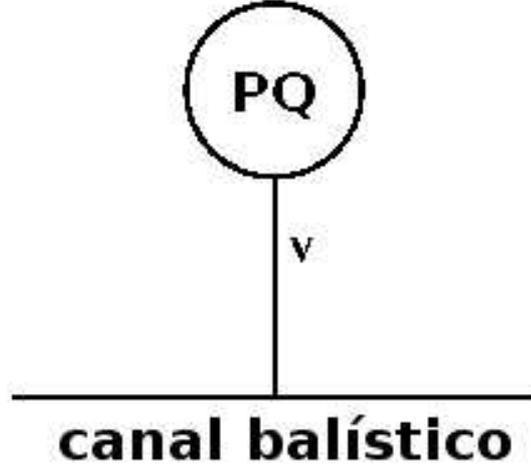


Figura 3.1: Imagem pictórica de um QD acoplado a um canal balístico.

com  $\tilde{V} = |0\rangle V \langle 1| + |1\rangle V \langle 0|$  sendo a hibridização. A função de Green vestida no sítio 0 pode ser escrita em termos da função de Green nua localizada no PQ, ( $g_{11}$ ) e da função de Green nua dos elétrons de condução ( $g_{00}$ )

$$G_{00}^{\sigma} = g_{00}^{\sigma} + g_{00}^{\sigma} V G_{10}^{\sigma} + g_{01}^{\sigma} V G_{00}^{\sigma}, \quad (3.3)$$

$$G_{10}^{\sigma} = g_{10}^{\sigma} + g_{10}^{\sigma} V G_{10}^{\sigma} + g_{11}^{\sigma} V G_{00}^{\sigma}. \quad (3.4)$$

resolvendo esse sistema de equações e considerando  $g_{10} = 0$  e  $g_{01} = 0$  podemos escrever

$$G_{00}^{\sigma} = \frac{g_{00}^{\sigma}}{(1 - g_{00}^{\sigma} V^2 g_{11}^{\sigma})}, \quad (3.5)$$

onde

$$g_{00}^{\sigma} = \left( \frac{-1}{2D} \right) \ln \left( \frac{z + D + \mu}{z - D + \mu} \right) \quad ; \quad g_{11}^{\sigma} = M_{2,\sigma}^{at}(z), \quad (3.6)$$

e  $M_{2,\sigma}^{at}(z)$  foi calculada a partir das Eqs. (2.18 e 2.43).

### 3.2 Resultados

Na Fig.(3.2) apresentamos a condutância do fio acoplado lateralmente ao ponto quântico. Nessa geometria, o efeito Kondo provoca uma anti-ressonância entre os elétrons de condução provenientes do canal balístico e os elétrons que formam a ressonância Kondo. Analizaremos a seguir as causas desse efeito sobre cada regime do sistema (Kondo, valência intermediária e vazio).

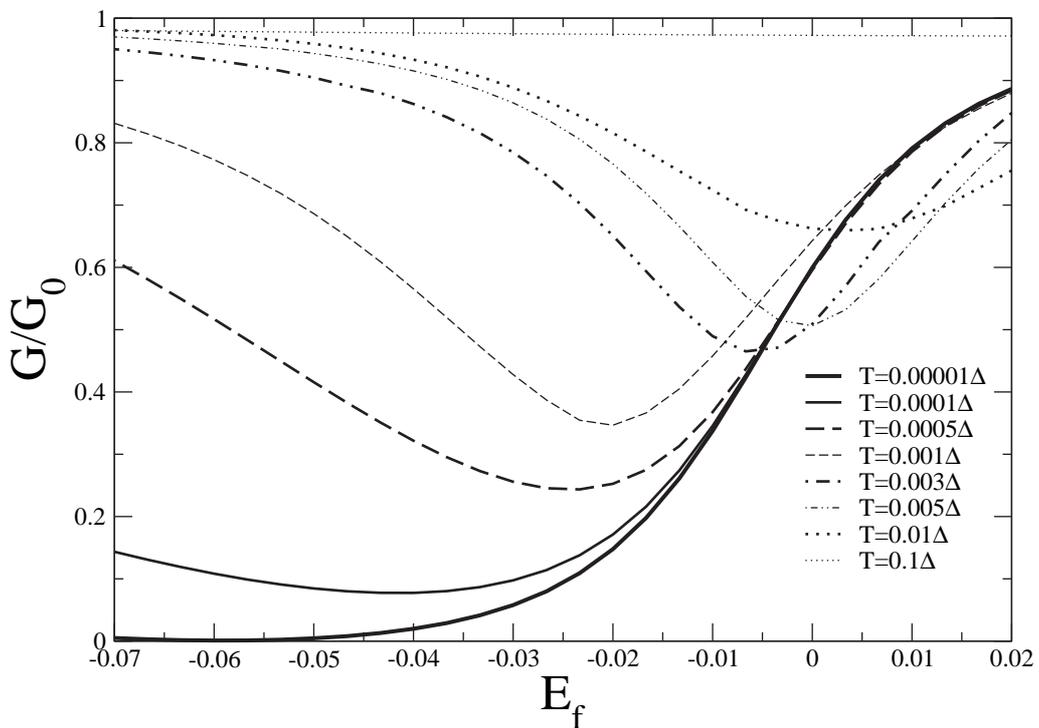


Figura 3.2: Condutância (em unidades de  $G_0$ ) como uma função da posição do nível eletrônico no QD, para diferentes valores de temperaturas.

No regime Kondo para  $E_f \sim -5.0\Delta$  a  $-7.0\Delta$  e temperaturas muito baixas, notamos que a condutância vai à zero. Isto se deve a uma interferência destrutiva entre os elétrons de condução provenientes do CB e os elétrons que formam a ressonância Kondo. O comportamento do ângulo de fase entre esses elétrons como função de  $E_f$ , pode ser estudado para uma temperatura muito baixa (veja Fig.(3.3), aplicando o mesmo procedimento utilizado por Kang *et. al.* [22], onde a função de Green do

ponto quântico satisfaz a regra de soma de Friedel e a condutância pode ser escrita como:

$$G = G_0 \cos^2 \phi \quad (3.7)$$

e  $\phi = (\pi/2)n_f$ , sendo  $n_f$  o número de ocupação no ponto quântico.

Na região Kondo ( $n_f \sim 1$ ), o ângulo  $\phi$  tende à  $\pi/2$  e a condutância vai à zero.

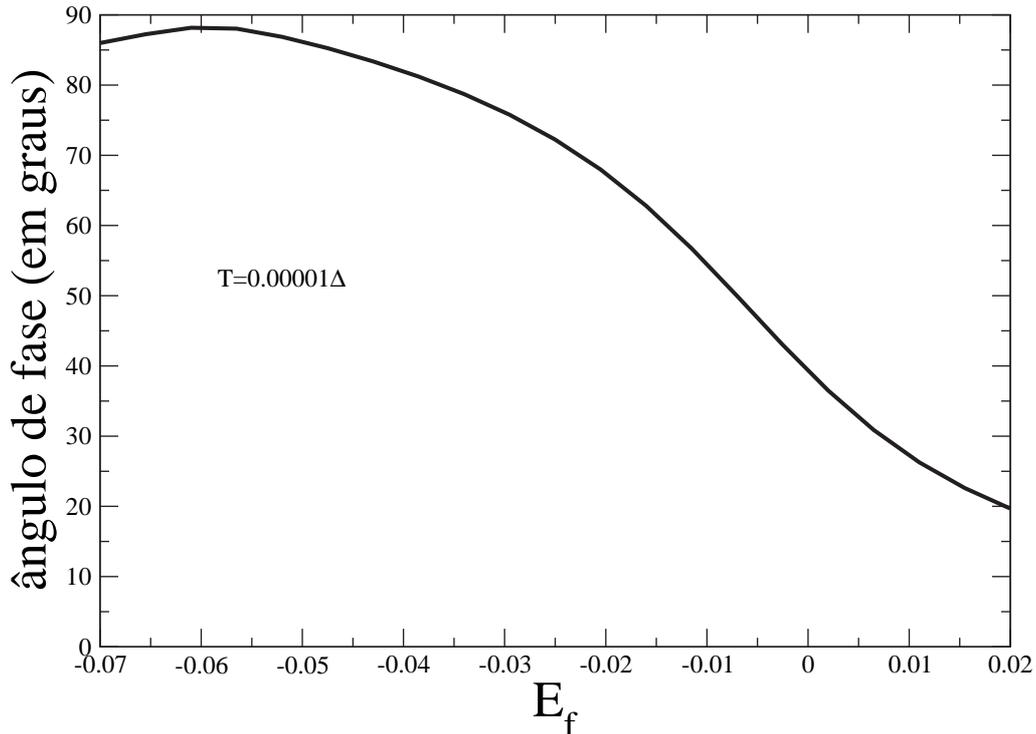


Figura 3.3: Ângulo de fase entre os elétrons provenientes do canal balístico e elétrons do ponto quântico. Na região Kondo ( $n_f \sim 1$ ), o ângulo  $\phi$  tende à  $\pi/2$  e a condutância vai à zero. Este é um efeito puramente quântico associado com a correlação Kondo e pode ser entendido em termos da interferência destrutiva entre o canal balístico e a ressonância Kondo.

A medida que aumentamos a temperatura, ainda na região entre  $E_f \sim -5.0\Delta$  e  $-7.0\Delta$ , podemos observar uma tendência ao aumento da condutância. Este efeito ocorre porque a temperatura do sistema se torna gradativamente maior que a temperatura de Kondo, acarretando então, na perda da solução Kondo (veja Fig.(3.4).

No regime de valência intermediária e no regime vazio, perdemos novamente a

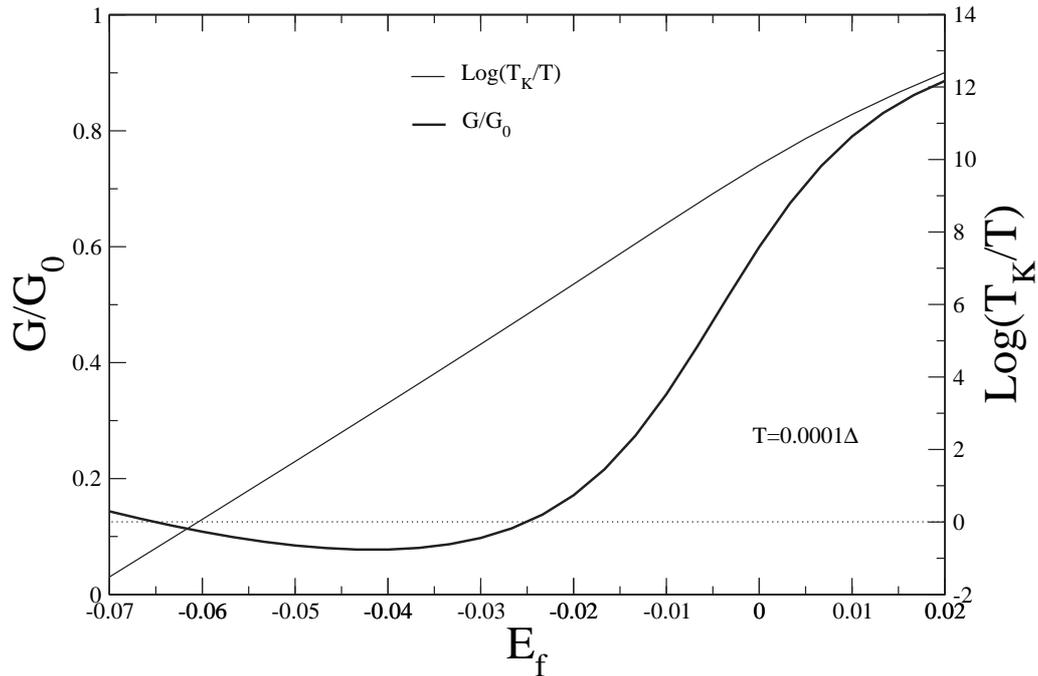


Figura 3.4: Condutância (em unidades de  $G_0$ ) e o logaritmo de  $T_K/T$  como função da posição do nível eletrônico no ponto quântico.

solução Kondo e isto se reflete no aumento da condutância.

Para altas temperaturas, a física de Kondo não é mais válida (para qualquer regime) e o acoplamento entre o ponto quântico e o fio se torna inefetivo, fazendo com que a condutância se comporte como uma transmissão balística simples.

## Capítulo 4

# Conclusões e perspectivas

Estendemos a ressonância de Kondo, na impureza de Anderson, através do modelo atômico. Formalmente, conhecemos a solução exata para as funções de Green do modelo da impureza de Anderson em termos de um cumulante efetivo, entretanto, esse cumulante não é conhecido. O modelo atômico consiste em substituir o cumulante efetivo exato das FG's, pelo cumulante efetivo exato da solução atômica. Porém, as FG's obtidas desse modo não satisfazem a completeza. Variando a posição do nível dos elétrons de condução  $\xi$  da solução exata, obtemos a baixas temperaturas, várias soluções que satisfazem a completeza, então escolhemos dentre essas soluções, aquela de menor energia livre de Helmholtz, e a identificamos como sendo a solução Kondo.

A partir do modelo atômico, tendo a completeza como vínculo, calculamos curvas de densidades de estados, em função da temperatura, e em função do nível localizado  $E_f$ . Quando aumentamos a temperatura a completeza deixa de ser satisfeita, o que leva ao desaparecimento do pico de Kondo. Comparamos nossos resultados com o GRN e NCA e obtivemos um excelente acordo na região Kondo. Finalmente fizemos uma aplicação simples do modelo a um ponto quântico lateralmente acoplado a um canal balístico [28]. Efetuamos o cálculo da condutância a partir da fórmula de Landauer e observamos que a baixas temperaturas a condutância se

anula, pois ocorre uma interferência destrutiva causada por uma diferença de fase de  $\pi/2$  entre os elétrons do canal balístico e os elétrons de condução ressonantes da impureza, consequência direta da satisfação da regra de soma de Friedel para o modelo atômico [29].

Dentro das perspectivas futuras do trabalho, podemos aplicar o modelo a diferentes situações físicas. Como o modelo fornece uma descrição bastante precisa do efeito Kondo a baixas temperaturas, pretendemos estender o estudo a sistemas nanoscópicos do tipo canal balístico com pontos quânticos acoplados, verificando a competição entre o efeito Kondo e a ressonância Fano. Uma aplicação interessante é o estudo do efeito Kondo em nanotubos de carbono. Já fizemos o cálculo da condutância para um nanotubo de carbono do tipo zig-zag com um ponto quântico acoplado lateralmente [30]. Neste trabalho, consideramos uma banda de condução realista (modelo tight-binding para a estrutura do grafite) e consequentemente esperamos uma riqueza maior dos resultados no que diz respeito à física do problema. O modelo também pode ser empregado em outras geometrias de sistemas nanoscópicos.

Outra possibilidade de trabalho futuro é a extensão do modelo atômico com completeza para a rede de Anderson e também para o caso das duas impurezas magnéticas onde poderemos estudar as interações RKKY entre o momento das impurezas e sua competição com o efeito Kondo. Pretendemos também estudar a extensão da nuvem de Kondo sobre uma cadeia linear mas para isso deveremos considerar as FG não diagonais.

## Apêndice A

# Operadores de Hubbard

Se supomos que os  $|j, \alpha \rangle$  formam uma base completa, então qualquer operador  $O_j$  que atua somente sobre elétrons do sítio  $j$  pode ser escrito em termos dos operadores  $X_j^{\alpha, \beta}$

$$O_j = \sum_{\alpha, \beta} \langle j, \alpha | O | j, \beta \rangle X_{j, \alpha \beta}, \quad (\text{A.1})$$

em particular

$$c_{j, \mu} = \sum_{\alpha, \beta} \langle j, \alpha | c_{j, \mu} | j, \beta \rangle X_{j, \alpha \beta}. \quad (\text{A.2})$$

Os operadores  $X_{j, \alpha \beta}$  também podem ser escritos em termos de combinações lineares de operadores de criação  $c_{j, \sigma}^\dagger$  e destruição  $c_{j, \sigma}$  usuais. Diremos que  $X_{j, \alpha \beta}$  é do tipo Fermi quando  $|\alpha \rangle$  e  $|\beta \rangle$  diferem por um número ímpar de Fermions e do tipo Bose se a diferença for par. Se tem a relação de comutação

$$[X_{j, \alpha \beta}; X_{i, \gamma \epsilon}]_- = 0 \quad (j \neq i) \quad (\text{A.3})$$

se  $X_{j, \alpha \beta}$  ou  $X_{i, \gamma \epsilon}$  tem caráter bosônico e a relação de anti-comutação

$$[X_{j, \alpha \beta}; X_{i, \gamma \epsilon}]_+ = 0 \quad (j \neq i) \quad (\text{A.4})$$

se ambos tem caráter fermiônico.

A relação mais geral de comutação, que resume a álgebra dos operadores  $X$ , surge de combinar as Eqs. (A.3) e (A.4) com (2.12):

$$[X_{j,\alpha\beta}; X_{i,\gamma\epsilon}]_{\mp} = \delta_{j,i} (\delta_{\beta,\gamma} X_{j,\alpha\epsilon} \mp \delta_{\alpha,\epsilon} X_{j,\gamma\beta}). \quad (\text{A.5})$$

Os operadores de Hubbard diagonais satisfazem a relação de completudeza

$$\sum_{\alpha} X_{j,\alpha\alpha} = I. \quad (\text{A.6})$$

Para o MAP, teremos a seguinte base do subespaço de Hilbert, correspondente aos estados  $f$  do Hamiltoniano de um sítio Eq. (2.10).

$$\begin{aligned} |j, 0\rangle, \\ |j, \sigma\rangle &= f_{j,\sigma}^{\dagger} |j, 0\rangle, \\ |j, \bar{\sigma}\rangle &= f_{j,\bar{\sigma}}^{\dagger} |j, 0\rangle, \\ |j, 2\rangle &= f_{j,\sigma}^{\dagger} f_{j,\bar{\sigma}}^{\dagger} |j, 0\rangle, \end{aligned} \quad (\text{A.7})$$

com auto-energias  $E_{j,0}$ ,  $E_{j,\sigma}$ ,  $E_{j,\bar{\sigma}}$  e  $E_{j,2}$  respectivamente. Este subespaço define dezesseis operadores de Hubbard  $X_{i,\alpha\beta}$ , que descrevem transições do estado  $\beta$  ao estado  $\alpha$ :

Quatro operadores diagonais do tipo Bose:  $X_{i,00}$ ,  $X_{i,\sigma\sigma}$ ,  $X_{i,\bar{\sigma}\bar{\sigma}}$ ,  $X_{i,22}$ .

Seis operadores não diagonais:

quatro do tipo Fermi:  $X_{i,0\sigma}$ ,  $X_{i,0\bar{\sigma}}$ ,  $X_{i,2\sigma}$ ,  $X_{i,2\bar{\sigma}}$

dois do tipo Bose:  $X_{i,\bar{\sigma}\sigma}$ ,  $X_{i,20}$ ,

e seus conjugados (obtidos permutando-se os índices). Neste trabalho, vamos supor que a energia de correlação local  $U$  entre elétrons  $f$  no mesmo sítio iônico é infinita, o que implica que a dupla ocupação de qualquer sítio expressa pela Eq. (2.6) é

nula. Assim, só irão aparecer no Hamiltoniano original Eq. (2.1) operadores de Hubbard que descrevem a ocupação simples, e que podem ser escritos em termos de operadores de criação e destruição de uma partícula por

$$\begin{aligned}
X_{j,0\sigma} &= (1 - n_{j,\bar{\sigma}})f_{j,\sigma}, \\
X_{j,0\bar{\sigma}} &= (1 - n_{j,\sigma})f_{j,\bar{\sigma}}, \\
X_{j,\sigma\bar{\sigma}} &= f_{j,\sigma}^\dagger f_{j,\bar{\sigma}}, \\
X_{j,\sigma\sigma} &= (1 - n_{j,\bar{\sigma}})n_{j,\sigma}, \\
X_{j,\bar{\sigma}\bar{\sigma}} &= (1 - n_{j,\sigma})n_{j,\bar{\sigma}}, \\
X_{j,00} &= 1 - (n_{j,\bar{\sigma}} + n_{j,\sigma}),
\end{aligned}
\tag{A.8}$$

com os correspondentes Hermitianos conjugados:  $X_{j,\sigma 0} = X_{j,0\sigma}^\dagger$ .

# Referências Bibliográficas

- [1] A. M. Clogston, B. T. Mathias, M. Peter, H. J. Williams, E. Corenzwit, e R. C. Sherwood, *Phys. Rev.* **125**, 541 (1962).
- [2] J. Friedel, *Nuovo Cimento (Suppl.)* **7**, 287 (1958).
- [3] A. J. Heeger, *Solid State Phys.* **23**, 283 (1969).
- [4] J. P. Franck, F. D. Manchester e Douglas L. Martin *Proc. Roy. Soc. (London)* **A263**, 494 (1961).
- [5] J. Kondo, *Progr. Theoret. Phys.* **32**, 37 (1964).
- [6] M. D. Daybell e W. A. Steyert, *Phys. Rev. Lett.* **18**, 398 (1967).
- [7] Y. Nagaoka *Phys. Rev.* **138**, A1112 (1965).
- [8] P. W. Anderson, *Phys. Rev.* **124**, 41 (1961).
- [9] J. Hubbard, *Proc. R. Soc. London, Ser. A* **285**, 542 (1965).
- [10] B. R. Alascio, R. Allub e A. Aligia, *J.Phys.C: Solid St. Phys.* **13**, 2869 (1980).
- [11] G. G. Martinez Pino, *Tese de doutorado*, Biblioteca da Universidade Estadual de Campinas (UNICAMP), SP - Brazil (1989).
- [12] D. N. Zubarev *Soviet Phys. Uspekhi* **3**, 320 (1960).
- [13] R. Franco, M. S. Figueira and M. E. Foglio, *Phys. Rev. B* **66**, 45112 (2002).

- [14] M. E. Foglio and M. S. Figueira, Phys. Rev. B **60**, 11361 (1999).
- [15] A. A. Abrikosov, L. P. Gorkov and I. E. Dzyaloshinski, *Quantum Field Theoretical Methods in Statistical Physics* Pergamon, Oxford, (1965).
- [16] S. Doniach and E. H. Sondheimer, *Green's Functions for Solid State Physicists* (Benjamin, New York, 1974)
- [17] M. S. Figueira and M. E. Foglio, Physica A **208**, 279(1994)
- [18] T. A. Costi, J. Kroha and P. Wölfle, Phys. Rev. B **53**, 1850 (1996).
- [19] D. Goldhaber-Gordon et al., Nature **391**, 156 (1998).
- [20] L. I. Glazman and V. Chandrasekar, Europhys. Lett. **19**, 623 (1992); T. K. Ng and P. A. Lee, Phys. Rev. Lett. **61**, 1768 (1988) ; L. I. Glazman and M. E. Raikh, JETP Lett, **47**, 452 (1988); S. Hershfield, J. H. Davies and J. W. Wilkins, Phys. Rev. Lett. **67**, 3720 (1991); Y. Meir, N. S. Wingreen and P.A. Lee, Phys. Rev. Lett. **70**, 2601 (1993) ; N. S. Wingreen and Y. Meir, Phys. Rev. B **49**, 11040 (1994); M. A. Davidovich, E. V. Anda, J. R. Iglesias and G. Chiappe, Phys. Rev. B **55**, 7335 (1997).
- [21] D. Goldhaber-Gordon, J. Göres, M. A. Kastner, Hadas Shtrikman, D. Mahalu and U. Meirav, Phys. Rev. Lett. **81**, 5225 (1998).
- [22] K. C. Kang, S. Y. Cho, J. J. Kim and S. C. Shin, Phys. Rev. B **63**, 113304 (2001).
- [23] V. Ferrari, G. Chiappe, E. V. Anda and M. A. Davidovich, Phys. Rev. Lett. **82**, 5088 (1999) ; C. A. Busser, E. V. Anda, A. L. Lima, M. A. Davidovich and G. Chiappe, Phys. Rev. B **62**, 9907 (2000); M. E. Torio, K. Hallberg, A. H. Ceccatto and C. R. Proetto, Phys. Rev. B **65**, 085302 (2002) ; A. A. Aligia and C. R. Proetto, Phys. Rev. B **65**, 165305 (2002).
- [24] L. I. Glazman and M. E. Raikh JETP Lett. **47**, 452 (1988).

- [25] R. Franco, M. S. Figueira and E. V. Anda, *Phys. Rev. B* **67**, 155301 (2003).
- [26] Kensuke Kobayashi, Hisashi Aikawa, Akira Sano, Shingo Katsumoto, Yasuhiro Iye, *cond-mat/0311497*.
- [27] M. S. Figueira, M. E. Foglio and G. G. Martinez, *Phys. Rev. B* **50**, 17933 (1994).
- [28] Trabalho submetido à *Brazilian Journal of Physics*.
- [29] Trabalho submetido à *Physical Review B*.
- [30] Trabalho submetido à *Brazilian Journal of Physics*.