

Alexandre Vilefort Hostalácio

**Modelo de Anderson com Repulsão
Coulombiana nos Níveis que se Acoplam com o
Ponto Quântico**

São Carlos

2019

Alexandre Vilefort Hostalácio

**Modelo de Anderson com Repulsão Coulombiana nos
Níveis que se Acoplam com o Ponto Quântico**

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-graduação em Física da Universidade Federal de São Carlos como requisito para a obtenção do título de Mestre em Física.

Universidade Federal de São Carlos – UFSCar

Departamento de Física

Orientador: Prof. Dr. Vivaldo Leiria Campo Júnior

São Carlos

2019



UNIVERSIDADE FEDERAL DE SÃO CARLOS

Centro de Ciências Exatas e de Tecnologia
Programa de Pós-Graduação em Física

Folha de Aprovação

Assinaturas dos membros da comissão examinadora que avaliou e aprovou a Defesa de Dissertação de Mestrado do candidato Alexandre Vilefort Hostalácio, realizada em 20/12/2019:

Vivaldo Leiria Campo Júnior

Prof. Dr. Vivaldo Leiria Campo Júnior
UFSCar

Celso Jorge Villas Boas

Prof. Dr. Celso Jorge Villas Boas
UFSCar

Valter Luiz Líbero

Prof. Dr. Valter Luiz Líbero
USP

Agradecimentos

À Universidade Federal de São Carlos (UFSCar) e ao seu Programa de Pós-Graduação em Física (PPGF), pela oportunidade da realização do curso de pós-graduação.

Ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq), pelo apoio financeiro no decorrer da pós-graduação.

Também ao meu orientador Prof. Dr. Vivaldo Leiria Campo Junior pelos anos de aprendizado e apoio.

Por último, agradeço aos meus familiares e amigos que sempre estiveram ao meu lado. Com um carinho especial a minha namorada que me aguentou todos esses anos de graduação e mestrado.

Resumo

Neste trabalho é feito um estudo do modelo de Anderson para o caso de um ponto quântico entre dois gases de elétrons, transistor de um elétron (SET), onde foi adicionado um termo de repulsão Coulombiana nos níveis que se acoplam diretamente com o ponto quântico. O modelo resultante foi tratado pela técnica do Grupo de Renormalização Numérico, sendo estudadas as propriedades termodinâmicas do ponto quântico e realizados estudos preliminares da condutância em regime de resposta linear como função da temperatura. A modificação no Hamiltoniano fez surgir a necessidade de calcular manualmente as matrizes iniciais que entram no programa do Grupo de Renormalização Numérico. Em geral, as duas bandas de condução, referentes aos contatos, podem ser manipuladas de modo a desacoplar uma das bandas. Com o novo termo adicionado, esse desacoplamento é impossível, sendo necessário reformular como é calculada a condutância. A contribuição do ponto quântico a algumas propriedades termodinâmicas pôde ser calculada e estudada, com ênfase no comportamento da temperatura Kondo. Para o estudo da condutância, foi proposto um método de cálculo que se revelou muito custoso computacionalmente, tornando inviável gerar os dados para o caso das bandas acopladas durante o tempo do mestrado. Porém, foi feita uma análise da adição da repulsão Coulombiana no caso de bandas desacopladas.

Palavras-chave: Grupo de Renormalização Numérico. modelo de Anderson. correlação no orbital f_0 . transistor de um elétron.

Abstract

In this work, a study of the Anderson model is done for the case of a quantum dot between two electron gases, single-electron transistor (SET), where a Coulombian repulsion term was added at the orbitals that are directly coupled to the quantum dot. The resulting model was treated by the Numerical Renormalization Group technique. The thermodynamic properties of the quantum dot were studied and a preliminary study of the conductance in the linear response regime as a function of the temperature was done. The change in the model Hamiltonian made it necessary to compute manually the initial matrices entering the Numerical Renormalization Group program. In general, the two conduction bands, corresponding to the electric contacts, can be manipulated so that one of them ends decoupled from the quantum dot. With the new term added, this decoupling is impossible, being necessary to reformulate how the conductance is computed. The contribution of the quantum dot to some thermodynamic properties was calculated and studied, with emphasis on the behavior of the Kondo temperature. For the study of the conductance, it was proposed a calculation method that proved very expensive computationally, preventing us to generate data for the case of coupled bands during the time of the Master of Science. However, an analysis of the addition of the Coulombian repulsion in the case of uncoupled bands was done.

Keywords: Numerical Renormalization Group. Anderson model. correlation on f_0 orbital. single-electron transistor.

Lista de ilustrações

Figura 1 – Imagens superior de um transistor de um elétron	16
Figura 2 – Esquema de SET	17
Figura 3 – Gráfico da condutância com modificação na defasagem	20
Figura 4 – Discretização logarítmica da banda	29
Figura 5 – Diagrama para a criação dos estados de H_0	40
Figura 6 – Discretização logarítmica com o parâmetro z	46
Figura 7 – Gráfico da entropia em função da temperatura fixado o parâmetro ϵ_0 no problema de 1 banda	54
Figura 8 – Gráfico da entropia em função da temperatura fixado o parâmetro U_0 no problema de 1 banda	55
Figura 9 – Gráfico do calor específico em função da temperatura fixado o parâmetro ϵ_0 no problema de 1 banda	56
Figura 10 – Gráfico do calor específico em função da temperatura fixado o parâmetro U_0 no problema de 1 banda	57
Figura 11 – Gráfico da susceptibilidade magnética em função da temperatura fixado o parâmetro ϵ_0 no problema de 1 banda	58
Figura 12 – Gráfico da susceptibilidade magnética em função da temperatura fixado o parâmetro U_0 no problema de 1 banda	59
Figura 13 – Gráfico da temperatura Kondo em função do parâmetro U_0 no problema de 1 banda	60
Figura 14 – Gráfico da temperatura Kondo em função do parâmetro ϵ_0 no problema de 1 banda	61
Figura 15 – Gráfico da temperatura Kondo em função do parâmetro U_0 em escala logarítmica	62
Figura 16 – Gráfico da diferença relativa das temperaturas Kondo no problema de 1 banda	63
Figura 17 – Gráfico da entropia em função da temperatura fixado o parâmetro ϵ_0 no problema de 2 bandas	65
Figura 18 – Gráfico da entropia em função da temperatura fixado o parâmetro U_0 no problema de 2 bandas	66
Figura 19 – Gráfico da susceptibilidade magnética em função da temperatura fixado o parâmetro ϵ_0 no problema de 2 bandas	67
Figura 20 – Gráfico da susceptibilidade magnética em função da temperatura fixado o parâmetro U_0 no problema de 2 bandas	68

Figura 21 – Gráfico da temperatura Kondo em função do parâmetro ϵ_0 no problema de 2 bandas	69
Figura 22 – Gráfico da temperatura Kondo em função do parâmetro U_0 no problema de 2 bandas	69
Figura 23 – Gráfico da Condutância para vários valores de ϵ_0	80
Figura 24 – Gráfico da Condutância com valores simétricos de ϵ_0	81
Figura 25 – Gráfico da comparação do efeito da perturbação	88
Figura 26 – Gráfico da média em z após perturbação	89

Sumário

	Introdução	15
I	MODELAGEM TEÓRICA	23
1	GRUPO DE RENORMALIZAÇÃO NUMÉRICO	25
1.1	O Hamiltoniano de Anderson	26
1.2	Repulsão nos orbitais próximos ao ponto quântico	27
1.3	Transformação do hamiltoniano para o tratamento via Grupo de Renormalização Numérico	28
1.3.1	Discretização Logarítmica	29
1.3.2	Tridiagonalização	32
1.3.3	Discretização logarítmica alternativa	33
1.3.4	Bandas de condução par e ímpar	34
1.4	Construção das matrizes	35
1.4.1	Método iterativo de diagonalização	35
1.4.2	Hamiltoniana da Etapa 0	38
1.4.3	Invariantes	39
II	APRESENTAÇÃO DOS RESULTADOS	43
2	PROPRIEDADES TERMODINÂMICAS	45
2.1	Cálculo das propriedades termodinâmicas	47
2.2	Pontos fixos	49
2.3	Gráficos das propriedades termodinâmicas do modelo com uma banda e repulsão coulombiana no orbital f_0	53
2.3.1	Entropia	54
2.3.2	Calor específico	55
2.3.3	Susceptibilidade Magnética	56
2.3.4	Comportamento da Temperatura Kondo para o caso de 1 banda	58
2.4	Gráficos das propriedades termodinâmicas do modelo com duas bandas e repulsão coulombiana nos orbitais $f_{0,L}$ e $f_{0,R}$	64
2.4.1	Entropia	65
2.4.2	Susceptibilidade Magnética	66
2.4.3	Temperatura Kondo para o caso de 2 bandas	67

3	CONSTRUÇÃO DO MÉTODO DE CÁLCULO DA CONDUTÂNCIA	71
3.1	Teoria de perturbação para o cálculo da condutância em regime de resposta linear	73
3.2	Caso desacoplado ($U_0 = 0$)	76
3.3	Gráficos da condutância no caso desacoplado	79
3.4	Caso acoplado	81
3.5	Resolvendo o delta de Dirac	82
3.5.1	Aplicando no caso desacoplado	84
3.6	Problema do truncamento	86
	Conclusão	91
	REFERÊNCIAS	93
	APÊNDICES	95
	APÊNDICE A – CÁLCULOS DA PERTURBAÇÃO	97
	APÊNDICE B – TABELAS	99

Introdução

O desenvolvimento experimental de dispositivos de nanoestrutura cresce e vem se aperfeiçoando a cada ano. Quanto menores os dispositivos, mais relevantes se tornam os efeitos quânticos associados ao confinamento e a consequente discretização dos níveis de energia. Desses dispositivos, o transistor de um elétron (SET) tem papel central no presente trabalho. O comportamento desse dispositivo reflete os efeitos de confinamento mencionados acima, porém, em baixíssimas temperaturas, um efeito quântico ainda mais sutil, o efeito Kondo, pode se manifestar, influenciando drasticamente o comportamento da sua condutância.

O transistor de um elétron consiste essencialmente em um ponto quântico conectado a dois contatos metálicos, de modo que a corrente elétrica para passar de um contato para o outro deve necessariamente atravessar o ponto quântico. Complementando o dispositivo, há eletrodos cujos potenciais elétricos são controláveis e servem para ajustar a corrente elétrica através do ponto quântico.

Pontos quânticos são partículas de semicondutores cujos tamanhos podem variar desde alguns nanômetros até cerca de 100 nm de diâmetro. O comportamento físico dos pontos quânticos pode ser relacionado ao de um poço de potencial que confina os elétrons nas três dimensões espaciais em uma região com tamanho da ordem do comprimento de onda de Broglie dos elétrons. Devido ao confinamento, os elétrons em um ponto quântico têm suas energias quantizadas, tais como em um átomo. Por essa razão, pontos quânticos são por vezes chamados átomos artificiais.

Devido à possibilidade de controle de suas propriedades variando o tamanho, a forma e a profundidade de poço de potencial, os pontos quânticos despertam grande interesse tecnológico. Possíveis aplicações incluem transistores, células solares, LEDs, diodos laser, geração de segundo harmônico, computação quântica e imageamento medicinal.

Existem vários métodos para fabricar um ponto quântico, entre eles estão a síntese coloidal^[1], a auto-montagem^[2] (self-assembly) e por eletrodos (electrical gating).

O ponto quântico que é considerado nesse trabalho é definido por eletrodos gravados na superfície de heteroestruturas semicondutoras que contêm gases bidimensionais de elétrons contidos em suas interfaces, este tipo específico de ponto quântico pode ter dimensões laterais entre 20 e 100 nm na região onde existe o confinamento.

A figura 1 é uma foto de um transistor de um elétron similar ao que se considera neste trabalho. Para facilitar a compreensão da figura 1 e de como o transistor de um elétron (SET) funciona, segue o esquema da figura 2.

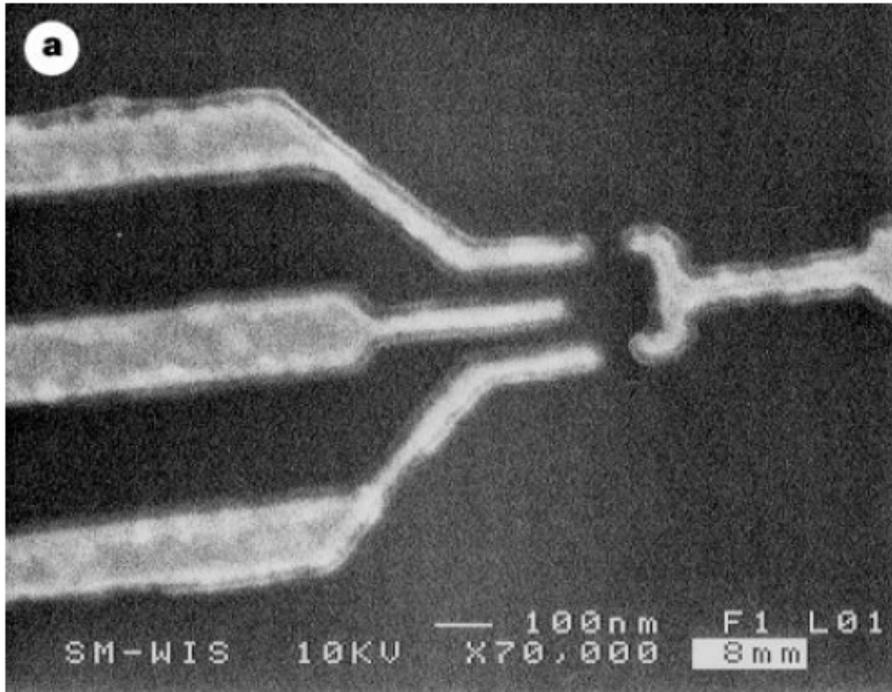


Figura 1 – Figura extraída na Ref. [3]. Imagem feita com microscópio eletrônico de varredura. Os eletrodos nas extremidades superior e inferior controlam a barreira de potencial que divide o gás bidimensional de elétrons entre o gás de cima e o de baixo. Por sua vez, o eletrodo do meio controla a potencial elétrico da pequena região no meio, com elétrons confinados, em relação ao gás de elétrons bidimensional. No caso do trabalho desta figura, os eletrodos foram depositados em cima de uma heteroestrutura de GaAs e AlGaAs. A Ref. [3] reporta a primeira medida experimental do efeito Kondo alterando a condutância através do ponto quântico.

Assim como num átomo, tanto a discretização dos níveis de energia quanto a repulsão Coulombiana entre os elétrons confinados desempenham papel central para o comportamento físico do ponto quântico se suas dimensões forem suficientemente pequenas. Sendo a repulsão Coulombiana apreciável, a adição de um único elétron se torna detectável pois pode demandar uma energia grande o suficiente para isto. Nessa situação, a corrente elétrica através do ponto quântico fica suprimida. Esse efeito é conhecido como *bloqueio Coulombiano*. Com o auxílio do eletrodo de controle, pode-se ajustar o potencial elétrico do ponto quântico. À medida que tornamos esse potencial mais positivo, vamos contrabalançando a repulsão Coulombiana até chegar a um ponto em que o estado fundamental com um elétron a mais tenha energia menor. Pode-se assim controlar o número de elétrons no ponto quântico. Quando o potencial é tal que as energias com N e com $N + 1$ elétrons ficam degeneradas, a repulsão Coulombiana é perfeitamente compensada, e a corrente elétrica através do ponto quântico não é mais suprimida. A condutância do dispositivo, como função do potencial elétrico do ponto quântico, é marcada por uma série de picos nas sucessivas degenerescências entre os estados com N e $N + 1$ elétrons, depois entre os estados com $N + 1$ e $N + 2$ elétrons e assim sucessivamente. Esse comportamento é uma assinatura do bloqueio Coulombiano.

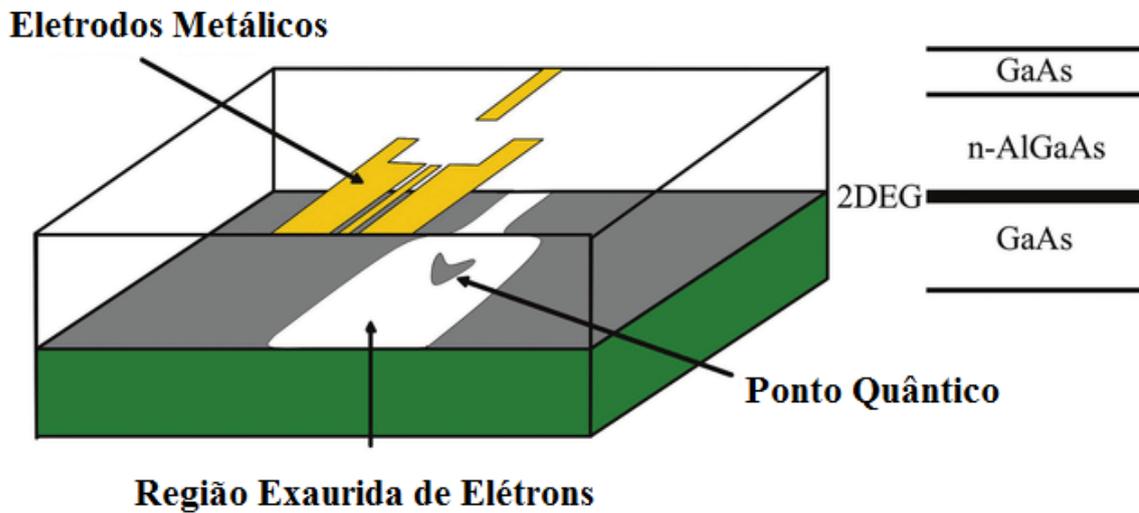


Figura 2 – Acima está uma ilustração^[4] de um esquema de um ponto quântico. É possível ver que um gás de elétrons bidimensional (2DEG) fica preso na interface de dois materiais. Os eletrodos, por sua vez, criam uma região exaurida de elétrons (região branca) que divide o gás bidimensional em duas partes. Além disso, um pequeno local no meio da região exaurida, com capacidade de conter elétrons, é formada pelo potencial dos eletrodos. Fazendo esse local pequeno o suficiente, é obtido um ponto quântico.

Em 1988, foi feita uma predição teórica^[5] de que o efeito Kondo poderia se manifestar num SET como os das figuras 1 and 2, sendo responsável por tornar a condutância muito maior do que seria possível numa situação de bloqueio Coulombiano.

O efeito Kondo, em homenagem a J. Kondo^[6], é o fenômeno que causa o mínimo da resistividade como função da temperatura, observado em certas ligas metálicas muito diluídas. O mínimo da resistividade foi descoberto em 1934. Com o passar dos anos, foi constatado que ele ocorria quando havia impurezas magnéticas diluídas num metal não-magnético, por exemplo, átomos de ferro diluídos em cobre. Demorou até 1964 para J. Kondo conseguir explicar o comportamento inesperado da condutividade como função da temperatura. Kondo adotou um modelo em que as impurezas magnéticas são tratadas como spins localizados, que se acoplam aos elétrons de condução através de uma interação de troca anti-ferromagnética,

$$H = \sum_{k,\mu} \epsilon_{k,\mu} c_{k,\mu}^\dagger c_{k,\mu} - \frac{J}{2V} \sum_{k,k',j} e^{-i(\vec{k}-\vec{k}')\cdot\vec{R}_j} c_{k,\mu}^\dagger \vec{\sigma}_{\mu,\nu} c_{k',\nu} \cdot \vec{S}_j. \quad (1)$$

O primeiro termo no Hamiltoniano acima descreve os elétrons de condução e o segundo termo descreve o acoplamento entre os elétrons de condução e os spins \vec{S}_j localizados nas posições \vec{R}_j . V representa o volume do metal e $\vec{\sigma}$ é o vetor cujas componentes x, y e z são dadas pelas matrizes de Pauli.

Através de um cálculo de teoria de perturbação em J de 3ª ordem, Kondo obteve

uma contribuição no termo de terceira ordem da resistividade proporcional a

$$-\ln(k_B T/E_F),$$

onde E_F é a energia de Fermi do metal. Essa contribuição cresce indefinidamente quando a temperatura T tende a zero. O trabalho de Kondo possibilitou explicar o mínimo da resistividade, mas a sua divergência no limite $T \rightarrow 0$ apareceu como um novo problema teórico, que ficou chamado de problema Kondo.

A partir daí, um grande esforço teórico foi dedicado a resolver o problema Kondo, isto é, a resolver as divergências que aparecem em teoria de perturbação. A versão mais simples, foi a de considerar uma única impureza com spin 1/2. Foi observado que a teoria de perturbação não poderia funcionar para temperaturas menores ou da ordem da temperatura Kondo,

$$k_B T_K \sim D e^{-\frac{1}{|\rho J|}},$$

onde D é a meia-largura da banda de condução do metal e ρ é a densidade de estados no nível de Fermi.

Aos poucos se compreendeu que para temperaturas menores do que T_K , o acoplamento entre o spin 1/2 e os elétrons de condução tornava-se efetivamente cada vez mais forte, o que impossibilitava o uso de teoria de perturbação para descrever o comportamento do modelo em baixa temperatura. Com o acoplamento anti-ferromagnético entre o spin localizado e os elétrons de condução, os processos de spin-flip (em que um elétron de condução ao ser espalhado tem seu spin invertido, com a correspondente inversão do spin localizado) tornam-se muito importantes e vão contribuindo cada vez mais fortemente para o espalhamento dos elétrons à medida que a temperatura é diminuída, fazendo com que a resistividade em algum mometo atinja um mínimo e passe a aumentar.

Com o acoplamento ficando cada vez mais forte, o sistema acaba por gerar um estado singleto entre o spin 1/2 e um elétron do metal. O spin da impureza fica agora blindado. Essa blindagem é o efeito Kondo. Com a blindagem, a taxa de espalhamento se satura e a resistividade atinge um máximo finito em $T = 0$.

No transístor de um elétron, quando o número de elétrons no ponto quântico for ímpar, teremos um spin localizado acoplado aos elétrons de condução de ambos os contatos metálicos. Ao baixar a temperatura, o crescimento do espalhamento reflete-se em uma maior transferência de elétrons de um contato para o outro, ou seja, em uma condutância não suprimida pelo bloqueio Coulombiano.

A forma mais simples de se modelar o transístor de um elétron é através do modelo de Anderson de uma impureza [7],

$$H = \sum_{k,i} \epsilon_k c_{k,i,\sigma}^\dagger c_{k,i,\sigma} + \epsilon_d c_{d,\sigma}^\dagger c_{d,\sigma} + U_d c_{d\uparrow}^\dagger c_{d\uparrow} c_{d\downarrow}^\dagger c_{d\downarrow} + V \sum_{k,i} (c_{k,i,\sigma}^\dagger c_{d\sigma} + c_{d\sigma}^\dagger c_{k,i,\sigma}), \quad (2)$$

onde o primeiro termo descreve as bandas de condução de um e outro contato ($i=L,R$), o segundo e o terceiro termos descrevem o ponto quântico através de um único nível de energia ϵ_d , que quando duplamente ocupado penaliza o ponto quântico com uma energia de repulsão Coulombiana U_d . Por fim, o quarto termo descreve a hibridização entre o nível de energia no ponto quântico e os estados de condução vinda da possibilidade de um elétron de condução tunelar para o ponto quântico e vice-versa. O parâmetro V , quando pequeno, reflete uma barreira de potencial alta produzida pelos eletrodos de controle que dividem o gás de elétrons original ilustrado nas figuras 1 e 2, quando V for elevado, temos uma barreira de potencial pequena, facilitando o tunelamento para o ponto quântico. O parâmetro ϵ_d representa a energia do nível localizado no ponto quântico, a qual pode ser alterada através do eletrodo de controle central visto nas figuras 1 e 2.

Segundo esse modelo, o ponto quântico poderia ter 0, 1 ou 2 elétrons apenas. Essa é uma grande simplificação em relação à situação real, onde pode haver dezenas de elétrons. Mas retomando a discussão sobre a sequência de picos na condutância como função do potencial do eletrodo central, podemos imaginar que o modelo com 1 elétron esteja representando o ponto quântico com um determinado número ímpar N_i de elétrons e as ocupações 0 e 2 elétrons no modelo estejam representando as ocupações com $N_i - 1$ e $N_i + 1$ elétrons, respectivamente, no sistema real. Se ajustarmos o parâmetro ϵ_d para que o ponto quântico com 1 elétron tenha a menor energia e se esta energia estiver bem separada das energias com o ponto quântico vazio ou duplamente ocupado, teremos efetivamente um spin localizado acoplado a elétrons de condução, levando-nos ao modelo Kondo [8].

O modelo de Anderson foi inicialmente utilizado para estudar impurezas magnéticas^[7, 9] em metais, porém, vem sendo usado com sucesso para descrever a condutância através de um ponto quântico na presença de efeito Kondo [5, 10, 11, 12, 13].

Desde a primeira observação da assinatura do efeito Kondo em medidas de transporte eletrônico através de um ponto quântico [3], investigações experimentais mais detalhadas foram sendo realizadas ao longo das últimas décadas [14, 15, 16, 17, 18]. Em muitos destes trabalhos, é feito o ajuste dos dados experimentais por curvas teóricas baseadas no modelo de Anderson. Oliveira e colaboradores [13] desenvolveram expressões para o ajuste da condutância em resposta linear como função da temperatura para qualquer conjunto de parâmetros do modelo de Anderson. Essas expressões envolvem um parâmetro de defasagem dos elétrons no nível de Fermi, um fator de assimetria entre os acoplamentos dos dois contatos e o ponto quântico e a curva numérica universal da condutância em função da temperatura para o modelo de Anderson simétrico. Entretanto, Oliveira [19] recentemente chamou a atenção que tais ajustes só conseguem ficar bons, quando se faz um deslocamento uniforme dos pontos experimentais. Em geral, argumenta-se que tal deslocamento deve-se a alguma corrente residual, mas na configuração de ponto quântico, não há razão para se esperar uma corrente residual. Ao se tentar o ajuste sem nenhum

deslocamento dos dados ^[18], um bom ajuste para $T < T_K$ implica em perda de qualidade para temperaturas maiores, mas ainda próximas de T_K . Essa dificuldade no ajuste pode significar que o modelo de Anderson deva ser ligeiramente modificado para conseguir descrever corretamente os dados experimentais, que parecem indicar que o spin localizado no ponto quântico já está parcialmente blindado mesmo a temperaturas muito maiores do que T_K ^[19]. A figura 3, extraída da Ref. ^[19] ilustra a situação.

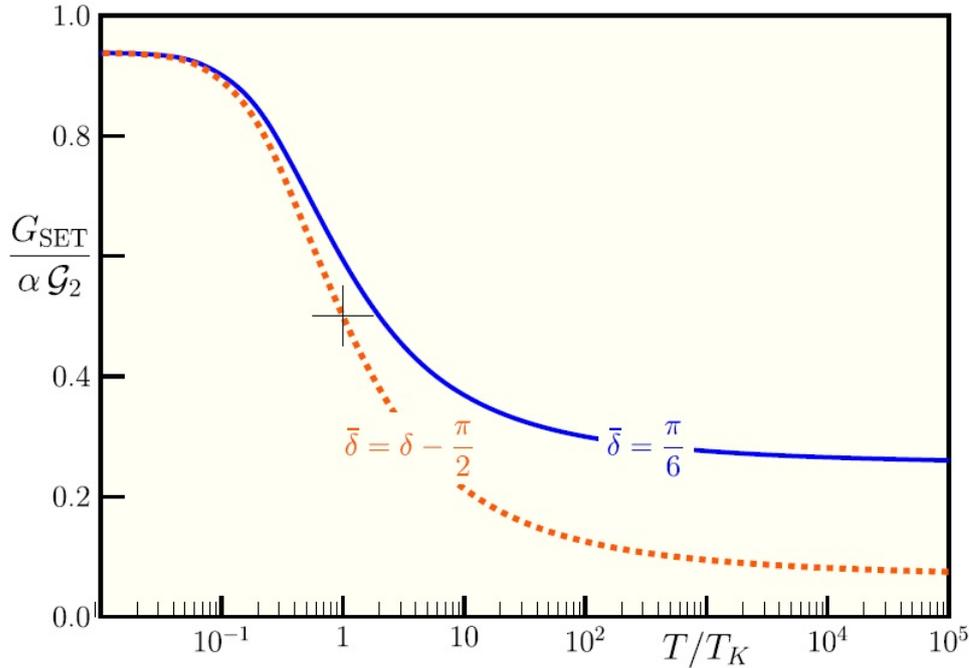


Figura 3 – As curvas mostradas neste gráfico foram ambas calculadas a partir da Eq. $\frac{G_{SET}(T/T_K)}{\alpha G_2} = (\sin^2\delta + \sin^2\bar{\delta})\mathcal{G}_1 + (\sin^2\delta - \sin^2\bar{\delta})(g_u(T/T_K) - \mathcal{G}_1)$. Com defasagem à $T = 0$ K de $\delta = 0.42\pi$. A curva pontilhada corresponde ao resultado do modelo de Anderson padrão, com defasagem em alta temperatura satisfazendo o vínculo $\bar{\delta} = \delta - \frac{\pi}{2}$. Para a curva sólida foi utilizado $\bar{\delta} = \frac{\pi}{6} > \delta - \frac{\pi}{2}$. Essa mudança no valor de $\bar{\delta}$ permite um melhor ajuste aos dados experimentais. $\mathcal{G}_2 = 2\mathcal{G}_1 = 2e^2/h$. Gráfico extraído da Ref. ^[19].

Essa situação foi a principal motivação para o estudo desenvolvido aqui. Foi introduzida uma pequena modificação no modelo de Anderson: levar em conta a repulsão Coulombiana nos orbitais que se acoplam ao ponto quântico em ambos os contatos, já que tentativa parecida não foi achada em nenhum trabalho da área. Como detalharemos mais adiante, tais orbitais são pequenos e portanto pode-se esperar que efeitos de repulsão Coulombiana não sejam desprezíveis. Sendo assim, esta pesquisa propõe obter as propriedades termodinâmicas e de transporte do SET descrito pelo modelo de Anderson generalizado conforme discutido acima utilizando a técnica do Grupo de Renormalização Numérico (NRG).

O trabalho foi dividido em duas partes, a primeira dedicada a fazer um estudo do Grupo de Renormalização Numérico aplicado ao modelo de Anderson com os termos adicionais de repulsão Coulombiana. Nesta parte, seguimos de perto os cálculos apresentados

na Ref. ^[9] e adaptados para receber esses termos adicionais. Se analisarmos o modelo de Anderson em (2), vemos facilmente que uma mudança de base envolvendo as combinações lineares

$$e_k = \frac{c_{k,L} + c_{k,R}}{\sqrt{2}} \quad (3)$$

$$o_k = \frac{c_{k,L} - c_{k,R}}{\sqrt{2}} \quad (4)$$

permite reescrever o modelo de modo a termos o ponto quântico acoplado somente à banda par (e_k), de modo que as propriedades termodinâmicas nessa situação são exatamente as do modelo de Anderson original estudado via NRG na Ref. ^[9]. Com a introdução dos termos adicionais de repulsão Coulombiana, esse desacoplamento não é mais possível, tornando o cálculo numérico das propriedades termodinâmicas bem mais pesado, mas ainda possível de ser feito em um computador pessoal.

A segunda parte do trabalho fica dedicada a apresentar os resultados obtidos numericamente via NRG. São apresentados e discutidos gráficos da contribuição do ponto quântico à susceptibilidade magnética, à entropia e ao calor específico para um certo conjunto de parâmetros do modelo. Em seguida, apresentamos uma análise do comportamento da temperatura Kondo em função de alguns parâmetros.

Ao estudar a condutância, a impossibilidade de desacoplarmos a banda ímpar exigiu construir um método de cálculo para a condutância. Essa formulação é cuidadosamente apresentada. Como se verá, a sua execução demandaria a um cálculo numérico bastante pesado, que infelizmente não pôde ser realizado durante o tempo de mestrado. Apresentaremos apenas alguns estudos preliminares.

Parte I

Modelagem Teórica

1 Grupo de Renormalização Numérico

Nesse capítulo será feito um estudo do método desenvolvido primeiramente por Wilson^[20], o Grupo de Renormalização Numérico.

O grupo de renormalização numérico é um procedimento inerentemente não perturbativo criado para resolver o modelo de Kondo^[6], que por sua vez é um modelo teórico simplificado, que descreve um sistema de impurezas spin- $\frac{1}{2}$ magnéticas, que se acoplam a elétrons de condução metálicos. Esse problema é notoriamente difícil de abordar teoricamente, uma vez que as técnicas perturbativas deixam de funcionar em baixa energia. Consideramos a situação experimental de ligas metálicas altamente diluídas, em que o modelo Kondo com um único spin localizado é apropriado. Em geral, ao se mencionar o modelo Kondo, subentende-se um único spin localizado.

No entanto, Wilson foi capaz de provar pela primeira vez usando o Grupo de Renormalização Numérico que o estado fundamental do modelo de Kondo é um estado de singlete. Talvez o mais importante foram as noções de renormalização, de pontos fixos e de fluxo de grupo de renormalização introduzidas no campo da teoria da matéria condensada, o que levou Wilson a ganhar o Prêmio Nobel em 1982.

O comportamento completo do modelo de Kondo, incluindo ambos o regime de momento localizado em alta temperatura e o regime de acoplamento forte a baixa temperatura, é capturado pelo grupo de renormalização numérico. Uma escala de energia exponencialmente pequena, a temperatura Kondo, aparece. Através dela pode-se descrever todas as propriedades em baixas energias. Essa característica de universalidade aparece em muitos problemas na física da matéria condensada e é um tema central da física de impurezas quânticas em particular.

Um problema físico que tem forte relação com o modelo de Kondo é o modelo de Anderson de uma impureza^[7] para impurezas magnéticas. O modelo de impurezas magnéticas de Anderson descreve um nível de impureza quântico com uma repulsão Coulombiana entre elétrons, que é acoplado aos elétrons de condução metálicos. Como discutido anteriormente, sob certas condições de parâmetros, o estado da impureza isolada com um elétron é o de menor energia, levando a uma situação de spin localizado, em que se pode derivar o modelo de Kondo a partir do modelo de Anderson^[8]. Entretanto, este último modelo é mais rico e contém outra física, associada a flutuações de carga. Nesse caso, o grupo de renormalização numérico foi estendido para lidar com o modelo de Anderson (capturando tanto a física de Kondo quanto a física de flutuação de valência) em 1980 por Krishna-murthy, Wilkins e Wilson^[9].

Vale ressaltar que no decorrer dos anos, desde a primeira aplicação do método

por Wilson, vários desenvolvimentos importantes foram feitos. Uma revisão moderna e abrangente foi compilada por Bulla, Costi e Pruschke^[21] em 2008 e serve como importante referência para este trabalho.

Outra aplicação do grupo de renormalização numérico é usá-lo para estudar propriedades de transporte eletrônico em um SET^[3, 13], que pode ser bem representado pelo modelo de Anderson para impurezas metálicas, conforme discutido na Introdução.

Na seção 1.3 será tratada a modelagem do problema que será resolvido pelo grupo de renormalização numérico e a seção 1.4 será dedicada a estudar o procedimento iterativo característico desta técnica numérica.

1.1 O Hamiltoniano de Anderson

O modelo de impureza de Anderson^[7] tem seu nome oriundo do físico Philip Warren Anderson. Físico ganhador do Nobel de Física em 1977, Anderson fez contribuições para as teorias de localização, antiferromagnetismo e quebra de simetria.

Por sua vez, o Hamiltoniano de Anderson é usada para descrever impurezas magnéticas incorporadas em metais. É frequentemente aplicada para descrever sistemas sujeitos ao efeito Kondo. Em sua forma mais simples, o modelo contém um termo que descreve a energia cinética dos elétrons de condução, um termo que descreve a impureza (composta por um único orbital, no qual há a repulsão de Coulomb quando duplamente ocupado) e um termo de hibridização que acopla os estados da banda de condução ao orbital da impureza. Para uma única impureza, a hamiltoniana assume a forma:

$$H = \sum_k \epsilon_k c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma} + \epsilon_d c_{d\sigma}^\dagger c_{d\sigma} + U_d c_{d\uparrow}^\dagger c_{d\uparrow} c_{d\downarrow}^\dagger c_{d\downarrow} + V \sum_k (c_{k\sigma}^\dagger c_{d\sigma} + c_{d\sigma}^\dagger c_{k\sigma}). \quad (1.1)$$

Na hamiltoniana da equação (1.1), ϵ_d representa a energia do nível da impureza e ϵ_k representa a energia dos níveis da banda de condução. Além disso, $c_{d\sigma}^\dagger$ é o operador que cria um elétron no orbital da impureza e $c_{k\sigma}^\dagger$ cria um elétron de momento k na banda. U_d representa a repulsão coulombiana na impureza e V é o termo de hibridização dos estados da impureza com a banda. Em ambos os casos, temos spin $\sigma = \pm \frac{1}{2}$, onde a soma em σ é subentendida.

Para o problema deste trabalho, o Hamiltoniano de Anderson na Eq. 1.1 receberá novos termos além de ser modificada para poder ser resolvida numericamente pelo Grupo de Renormalização Numérico. Vamos inicialmente detalhar o que é a repulsão nos orbitais próximos ao ponto quântico.

1.2 Repulsão nos orbitais próximos ao ponto quântico

A proposta desse trabalho é acrescentar um termo novo no Hamiltoniano de Anderson, o termo adicionado deve representar a repulsão de elétrons que se acoplam diretamente com o ponto quântico (os orbitais próximos ao ponto quântico), de modo que esperamos alteração nas propriedades do ponto quântico. Seguiremos de perto o trabalho original de Khrishna-murthy, Wilkins e Wilson [9].

Com essa ideia em mente, o termo de hibridização entre a impureza e a banda de condução será expresso via um único estado localizado no espaço (portanto, com momento k não definido) $f_{0\sigma}$. Analisando o termo de hibridização na equação (1.1), vamos fazer

$$\sum_k c_{k\sigma} = Af_{0\sigma}, \quad (1.2)$$

de modo que

$$V \sum_k (c_{k\sigma}^\dagger c_{d\sigma} + c_{d\sigma}^\dagger c_{k\sigma}) = VA(f_{0\sigma}^\dagger c_{d\sigma} + c_{d\sigma}^\dagger f_{0\sigma}). \quad (1.3)$$

A é uma constante de normalização para impor que $\{f_{0\sigma}, f_{0\sigma'}^\dagger\} = \delta_{\sigma,\sigma'}$.

Como f_0^\dagger é cria um elétron num estado localizado, pois é composto pela combinação uniforme de todos os estados extendidos da banda de condução, é fisicamente razoável que haja uma repulsão coulombiana quando esse estado for ocupado por dois elétrons. Se a localização do estado da impureza nos leva a considerar a repulsão coulombiana na impureza, então, pela mesma razão, vamos considerar a repulsão coulombiana no orbital f_0 , que será introduzida no modelo através do termo

$$U_0 n_{0\uparrow} n_{0\downarrow},$$

onde $n_{0\sigma} \equiv f_{0\sigma}^\dagger f_{0\sigma}$ é o operador número para os elétrons que estiverem em $f_{0\sigma}$ e $U_0 > 0$ é a energia de repulsão coulombiana nesse orbital.

No caso do SET, existe uma banda de elétrons de condução à esquerda e uma outra banda de elétrons de condução à direita, como é ilustrado pela figura 2, com o ponto quântico servindo como ponte para elétrons passarem de uma banda para a outra. A hamiltoniana que modela esse problema é dada por:

$$\begin{aligned} H = & \sum_k \epsilon_k c_{Lk\sigma}^\dagger c_{Lk\sigma} + \sum_k \epsilon_k c_{Rk\sigma}^\dagger c_{Rk\sigma} + \epsilon_d c_{d\sigma}^\dagger c_{d\sigma} + U_d c_{d\uparrow}^\dagger c_{d\uparrow} c_{d\downarrow}^\dagger c_{d\downarrow} \\ & + V_R \sum_k (c_{Rk\sigma}^\dagger c_{d\sigma} + c_{d\sigma}^\dagger c_{Rk\sigma}) + V_L \sum_k (c_{Lk\sigma}^\dagger c_{d\sigma} + c_{d\sigma}^\dagger c_{Lk\sigma}). \end{aligned} \quad (1.4)$$

Assim, é possível agora introduzir os termos de repulsão coulombiana nos orbitais f_0 tanto da esquerda quanto da direita, com energias de repulsão $U_{0,L}$ e $U_{0,R}$, respectivamente.

Ficamos com a seguinte hamiltoniana

$$H = \sum_{i=L,R} \left[\sum_k \epsilon_k c_{k,i,\sigma}^\dagger c_{k,i,\sigma} + \sum_k V_i (c_{k,i,\sigma}^\dagger c_{d,\sigma} + c_{d,\sigma}^\dagger c_{k,i,\sigma}) + U_{0,i} n_{0,i\uparrow} n_{0,i\downarrow} \right] + \epsilon_d c_{d,\sigma}^\dagger c_{d,\sigma} + U_d n_{d\uparrow} n_{d\downarrow}, \quad (1.5)$$

onde o índice $i = L, R$ indica a banda da esquerda (L) e a da direita (R).

Acrescentar os termos $U_{0,L}$ e $U_{0,R}$ na hamiltoniana cria algumas complicações para o cálculo das autoenergias, dos autoestados e das propriedades do ponto quântico, de modo geral. No decorrer do trabalho será vista com mais detalhes a abordagem desses problemas. Antes, será mostrado na próxima seção como modelar uma hamiltoniana para que seja possível aplicar o Grupo de Renormalização Numérico.

1.3 Transformação do hamiltoniano para o tratamento via Grupo de Renormalização Numérico

A hamiltoniana da equação (1.5) precisa ser transformada para uma forma possível de resolver pelo método do Grupo de Renormalização Numérico. Nessa seção serão refeitos os cálculos encontrados no artigo de Krishna-murthy^[9] adaptados para um problema de duas bandas em duas dimensões.

O objetivo é usar uma escala logarítmica e fazer aproximações para construir uma hamiltoniana numa base nova de operadores que contenham os f_0 , da equação (1.2), e assim preparar a hamiltoniana para os cálculos que serão feitos numericamente.

Dessa forma, para facilitar o trabalho de lidar com a hamiltoniana do modelo de Anderson e possibilitar a construção do Grupo de Renormalização Numérico, será usada a representação da energia com operadores que criam elétrons em um contínuo ao invés da representação do momento linear. Sendo ρ_L e ρ_R as densidades de estado de um elétron, por spin, das bandas da esquerda e da direita, a hamiltoniana fica:

$$H = \sum_{i=L,R} \left[\int_{-D}^D \epsilon a_{\epsilon,i,\sigma}^\dagger a_{\epsilon,i,\sigma} d\epsilon + \int_{-D}^D [\rho_i(\epsilon)]^{1/2} V_i (a_{\epsilon,i,\sigma}^\dagger c_{d\sigma} + c_{d\sigma}^\dagger a_{\epsilon,i,\sigma}) d\epsilon \right] + \epsilon_d c_{d\sigma}^\dagger c_{d\sigma} + U_d (c_{d\uparrow}^\dagger c_{d\uparrow})(c_{d\downarrow}^\dagger c_{d\downarrow}) + U_{0,L} n_{0,L\uparrow} n_{0,L\downarrow} + U_{0,R} n_{0,R\uparrow} n_{0,R\downarrow}. \quad (1.6)$$

Também é conveniente utilizar energias relativas ao extremo da banda, D , definindo uma nova variável adimensional, $\zeta = \epsilon/D$, que vai de -1 à 1 . Além disso, vamos ignorar a dependência de ρ_i e V_i com a energia. Essas duas grandezas vão ser fundidas num único parâmetro, a largura de linha

$$\Gamma_i = \pi \rho_i V_i^2. \quad (1.7)$$

Com a mudança de variável, os operadores se transformam na forma $a_{\zeta\sigma} \equiv \sqrt{D}a_{e\sigma}$ e obedecem relações de anti-comutação dadas por:

$$\{a_{\zeta\sigma}, a_{\zeta'\nu}\} = \delta_{\sigma\nu}\delta(\zeta - \zeta'). \quad (1.8)$$

De modo que se obtém,

$$\begin{aligned} \frac{H}{D} = & \sum_{i=L,R} \left[\int_{-1}^1 \zeta a_{\zeta,i,\sigma}^\dagger a_{\zeta,i,\sigma} d\zeta + \left(\frac{\Gamma_i}{\pi D} \right)^{\frac{1}{2}} \int_{-1}^1 (a_{\zeta,i,\sigma}^\dagger c_{d\sigma} + c_{d\sigma}^\dagger a_{\zeta,i,\sigma}) d\zeta \right] \\ & + \frac{\epsilon_d}{D} c_{d\sigma}^\dagger c_{d\sigma} + \frac{U_d}{D} (c_{d\uparrow}^\dagger c_{d\uparrow})(c_{d\downarrow}^\dagger c_{d\downarrow}) + \frac{U_{0,L}}{D} n_{0,L\uparrow} n_{0,L\downarrow} + \frac{U_{0,R}}{D} n_{0,R\uparrow} n_{0,R\downarrow}. \end{aligned} \quad (1.9)$$

Com essas mudanças, a hamiltoniana apresenta apenas a mínima estrutura essencial, tendo somente os parâmetros adimensionais $\frac{\epsilon_d}{D}$, $\frac{U_d}{D}$, $\frac{U_{L0}}{D}$, $\frac{U_{R0}}{D}$, $\frac{\Gamma_L}{D}$ e $\frac{\Gamma_R}{D}$ acompanhando os operadores de criação/destruição de elétrons. O próximo passo é criar uma discretização logarítmica da banda de energia para tornar possível a aplicação do método numérico ao problema.

1.3.1 Discretização Logarítmica

A principal motivação para uma discretização da banda de condução foi a divergência logarítmica encontrada por Kondo^[6] em seu trabalho quando aplicou o método perturbativo. De modo a contornar o problema da mesma forma que Wilson^[22] fez, será feita uma discretização logarítmica que consiste em introduzir o parâmetro $\Lambda (> 1)$ e usá-lo para dividir o domínio de ζ , $[-1, 1]$, em sequências de intervalos que vão de $\Lambda^{-(n+1)}$ até Λ^{-n} (enésima divisão de ζ do lado positivo), e $-\Lambda^{-n}$ até $-\Lambda^{-(n+1)}$ do lado negativo de ζ , como ilustrado na figura 4^[9].

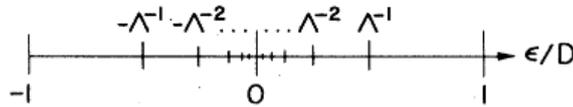


Figura 4 — O esquema acima^[9] representa a discretização logarítmica da banda, usando o termo $\lambda (> 1)$ para separar a banda de energia em sub-intervalos que vão de $-\Lambda^{-n}$ até $-\Lambda^{-(n+1)}$ na parte negativa e de $\Lambda^{-(n+1)}$ até Λ^{-n} na parte positiva da escala de energia.

A discretização logarítmica permite separar as energias dos elétrons em diferentes ordens de magnitude, cada uma contribuindo igualmente para a divergência logarítmica encontrada nas soluções perturbativas do modelo de Anderson. Fazendo $\Lambda \rightarrow 1$, recupera-se o limite do contínuo, em que a discretização deixa de ser uma aproximação.

Essa discretização tem o efeito de separar as muitas escalas de energia da banda de condução, de forma que a região de interesse em torno de nível de Fermi, $\epsilon/D = 0$, é a que contém o maior número de divisões.

Seguindo como foi feito no trabalho de Krishna-murthy^[9], é possível definir, para cada sub-intervalo da discretização logarítmica, um conjunto completo de funções ortonormais. Vamos escolher ondas planas,

$$\psi_{np}^{\pm}(\zeta) = \frac{e^{\pm i(2\pi p\zeta/L_n)}}{\sqrt{L_n}}, \quad (1.10)$$

onde as funções $\psi_{np}^{\pm}(\zeta)$ são iguais a 0 fora do sub-intervalo $\Lambda^{-n-1} < \pm\zeta < \Lambda^{-n}$. O sinal \pm indica a região positiva (ou negativa) de ζ , e L_n é o comprimento da n -ésima divisão, dado por:

$$L_n = \Lambda^{-n} - \Lambda^{-n-1}. \quad (1.11)$$

Onde p é o inteiro que indexa a base de Fourier, vai de $-\infty < p < \infty$.

Sendo a frequência fundamental de Fourier da n -ésima divisão dada por:

$$\omega_n = \frac{2\pi}{\Lambda^{-n}(1 - \Lambda^{-1})}, \quad (1.12)$$

substituindo os valores de L_n e ω_n na equação (1.10) obtém-se

$$\psi_{np}^{\pm}(\zeta) = \frac{\Lambda^{n/2}}{(1 - \Lambda^{-1})^{1/2}} e^{\pm i(\omega_n p \zeta)}. \quad (1.13)$$

Tendo introduzido uma base discreta de funções ortonormais, vamos introduzir os correspondentes operadores fermiônicos de criação

$$\begin{aligned} a_{n,p,\sigma}^{\dagger} &= \int_{\Lambda^{-n-1}}^{\Lambda^{-n}} \psi_{n,p}^+(\zeta) a_{\zeta,\sigma}^{\dagger} d\zeta \\ b_{n,p,\sigma}^{\dagger} &= \int_{-\Lambda^{-n}}^{-\Lambda^{-n-1}} \psi_{n,p}^-(\zeta) a_{\zeta,\sigma}^{\dagger} d\zeta, \end{aligned} \quad (1.14)$$

que criam elétrons nos estados com funções de onda no domínio das energias dadas por $\psi_{n,p,\sigma}^{\pm}(\zeta)$. A transformada inversa é dada por

$$\begin{aligned} a_{\zeta,\sigma}^{\dagger} &= \sum_p \left(\psi_{n,p}^+(\zeta) \right)^* a_{n,p,\sigma}^{\dagger}, \quad \text{se } \Lambda^{-n-1} < \epsilon < \Lambda^{-n} \\ a_{\zeta,\sigma}^{\dagger} &= \sum_p \left(\psi_{n,p}^-(\zeta) \right)^* b_{n,p,\sigma}^{\dagger}, \quad \text{se } -\Lambda^{-n} < \epsilon < -\Lambda^{-n-1} \end{aligned} \quad (1.15)$$

Pode-se, desse modo, reescrever a hamiltoniana da equação (1.9) utilizando os operadores discretos $a_{np\sigma}$, no lugar dos operadores $a_{\zeta\sigma}$. Para isso, é necessário transformar os termos $\int_{-1}^1 \zeta a_{\zeta\sigma} a_{\zeta\sigma}^{\dagger} d\zeta$ e $\int_{-1}^1 a_{\zeta\sigma} d\zeta$ para termos que dependam dos operadores discretos:

$$\begin{aligned} \int_{-1}^1 \zeta a_{\zeta\sigma}^{\dagger} a_{\zeta\sigma} d\zeta &= \frac{1}{2} (1 + \Lambda^{-1}) \sum_{np} \Lambda^{-n} (a_{np\sigma}^{\dagger} a_{np\sigma} - b_{np\sigma}^{\dagger} b_{np\sigma}) \\ &+ \frac{(1 + \Lambda^{-1})}{2\pi i} \sum_n \sum_{p \neq p'} \frac{\Lambda^{-n}}{p' - p} \exp \left[\frac{2\pi i(p' - p)}{1 - \Lambda^{-1}} \right] (a_{np\sigma}^{\dagger} a_{np'\sigma} - b_{np\sigma}^{\dagger} b_{np'\sigma}); \end{aligned} \quad (1.16)$$

$$\int_{-1}^1 a_{\zeta\sigma} d\zeta = (1 - \Lambda^{-1})^{\frac{1}{2}} \sum_n \Lambda^{-n/2} (a_{n0\sigma} + b_{n0\sigma}). \quad (1.17)$$

Para obter as equações (1.16) e (1.17) foram feitas apenas manipulações matemáticas utilizando as definições dos operadores.

Assim podemos obter uma hamiltoniana com os níveis de energia discretizados logaritmicamente. Feita a discretização da banda de condução de forma logarítmica, fica visível pelas equações (1.17) e (1.9) que o ponto quântico apenas se acopla diretamente com os operadores $a_{Ln0\sigma}$, $b_{Ln0\sigma}$, $a_{Rn0\sigma}$ e $b_{Rn0\sigma}$. Já os operadores $a_{Lnp\sigma}$, $b_{Lnp\sigma}$, $a_{Rnp\sigma}$ e $b_{Rnp\sigma}$, com $p \neq 0$, somente devem ser considerados por se acoplarem com os operadores $a_{Ln0\sigma}$, $b_{Ln0\sigma}$, $a_{Rn0\sigma}$ e $b_{Rn0\sigma}$ através de um fator de $(1 - \Lambda^{-1})/2\pi$, esse acoplamento será pequeno o quão próximo Λ esteja de 1.

Assim, é possível negligenciar a contribuição dos termos com $p \neq 0$ e fazer uma primeira aproximação utilizando apenas os operadores com $p = 0$, a hamiltoniana da equação (1.9) utilizando a equação (1.17) e equação (1.16) apenas com $p = 0$:

$$\begin{aligned} \frac{H}{D} \cong & \frac{1}{2}(1 + \Lambda^{-1}) \sum_{n=0}^{\infty} \Lambda^{-n} [a_{Ln0\sigma}^\dagger a_{Ln0\sigma} + b_{Ln\sigma}^\dagger b_{Ln\sigma}] + \left[\frac{2\Gamma_L}{\pi D} \right]^{\frac{1}{2}} (f_{0,L,\sigma}^\dagger c_{d\sigma} + c_{d\sigma}^\dagger f_{0,L,\sigma}) \\ & + \frac{1}{2}(1 + \Lambda^{-1}) \sum_{n=0}^{\infty} \Lambda^{-n} [a_{Rn0\sigma}^\dagger a_{Rn0\sigma} + b_{Rn\sigma}^\dagger b_{Rn\sigma}] + \left[\frac{2\Gamma_R}{\pi D} \right]^{\frac{1}{2}} (f_{0,R,\sigma}^\dagger c_{d\sigma} + c_{d\sigma}^\dagger f_{0,R,\sigma}). \\ & + \frac{\epsilon_d}{D} c_{d\sigma}^\dagger c_{d\sigma} + \frac{U_d}{D} n_{d\uparrow} n_{d\downarrow} \\ & + \frac{U_0}{D} n_{0,L,\uparrow} n_{0,L,\downarrow} + \frac{U_0}{D} n_{0,R,\uparrow} n_{0,R,\downarrow}. \end{aligned} \quad (1.18)$$

Em (1.18), aparecem os operadores $f_{0,L,\sigma}$ e $f_{0,R,\sigma}$, dados por

$$\begin{aligned} f_{0,i,\sigma} &= \frac{1}{\sqrt{2}} \int_{-1}^1 a_{\zeta,i,\sigma} d\zeta \\ &= \left[\frac{1}{2}(1 - \Lambda^{-1}) \right]^{\frac{1}{2}} \sum_{n=0}^{\infty} \Lambda^{-n/2} (a_{i,n,0\sigma} + b_{i,n,0\sigma}), \end{aligned} \quad (1.19)$$

onde $i = L, R$. Como a transformação para a base discreta preserva integralmente o termo de hibridização, esses operadores f_0 são exatamente os mesmos introduzidos anteriormente em (1.2) e que formam os operadores número que acompanham os termos $U_{0,L}$ e $U_{0,R}$.

Desse modo, foi possível mudar de uma hamiltoniana continua da equação (1.9), com operadores que criam elétrons com todas as possibilidades de energia entre -1 e $+1$, para uma hamiltoniana discreta da equação (1.18), com operadores que criam elétrons em estados discretos com energias da ordem de $\pm\Lambda^{-n}$. Ainda mantemos um grande refinamento em torno do nível de Fermi, permitindo o cálculo de propriedades a temperaturas $k_B T \ll D$.

1.3.2 Tridiagonalização

Na equação (1.18), o ponto quântico é acoplada apenas com os operadores f_{L0} e f_{R0} , que são essencialmente os operadores dos elétrons das bandas de condução da esquerda e da direita nas redondezas da impureza. Nesse caso, é conveniente fazer uma transformação unitária do conjunto de operadores $\{a_{Ln\sigma}, b_{Ln\sigma}\}$ e $\{a_{Rn\sigma}, b_{Rn\sigma}\}$ para um novo conjunto ortogonal $\{f_{Ln\sigma}\}$ e $\{f_{Rn\sigma}\}$, com $f_{L0\sigma}$ e $f_{R0\sigma}$ descritos por (1.19).

Como o termo cinético dos elétrons da banda de condução é diagonal com o conjunto $\{a_{Ln\sigma}, b_{Ln\sigma}\}$ e $\{a_{Rn\sigma}, b_{Rn\sigma}\}$, qualquer transformação fora deste conjunto vai gerar operadores acoplados um com o outro. A melhor opção possível é escolher uma transformação de tal forma que os operadores $\{f_{Ln\sigma}\}$ e $\{f_{Rn\sigma}\}$ apresentam acoplamento apenas com os vizinhos mais próximos, no caso de $f_{Ln\sigma}$ o acoplamento é com $f_{L(n\pm 1)\sigma}$, de modo que a banda de condução fica tridiagonal simétrica com os termos da diagonal principal nulos nessa base. A hamiltoniana escrita com os novos operadores fica:

$$\begin{aligned} \frac{H}{D} = & \sum_{i=L,R} \left[\frac{(1 + \Lambda^{-1})}{2} \sum_{n=0}^{\infty} \Lambda^{-n/2} \xi_n \left(f_{i n \sigma}^\dagger f_{i(n+1)\sigma} + h.c \right) + \left(\frac{2\Gamma_i}{\pi D} \right)^{1/2} \left(f_{i 0 \sigma}^\dagger c_{d\sigma} + h.c \right) \right] \\ & + \frac{\epsilon_d}{D} c_{d\sigma}^\dagger c_{d\sigma} + \frac{U_d}{D} n_{d\uparrow} n_{d\downarrow} + \frac{U_{L0}}{D} n_{L0\uparrow} n_{L0\downarrow} + \frac{U_{R0}}{D} n_{R0\uparrow} n_{R0\downarrow}. \end{aligned} \quad (1.20)$$

onde foi utilizado, ^[20]

$$\xi_n = (1 - \Lambda^{-n-1})(1 - \Lambda^{-2n-1})^{-1/2}(1 - \Lambda^{-2n-3})^{-1/2}, \quad (1.21)$$

ξ_n podendo ser substituída por 1 para n suficiente grande.

Nessa nova formulação os operadores $f_{1\sigma}$ e $f_{2\sigma}$ são dados por:

$$f_{1\mu} = \left[\frac{1}{2}(1 - \Lambda^{-3}) \right]^{1/2} \sum_{n=0}^{\infty} \Lambda^{-3n/2} (a_{n\sigma} - b_{n\sigma}), \quad (1.22)$$

$$f_{2\mu} = \left(\frac{1}{2} \Lambda \right) \frac{(1 - \Lambda^{-5})^{1/2}}{(1 - \Lambda^{-2})} \sum_{n=0}^{\infty} [(1 - \Lambda^{-3}) \Lambda^{-5n/2} - (1 - \Lambda^{-1}) \Lambda^{-n/2}] (a_{n\sigma} + b_{n\sigma}). \quad (1.23)$$

Como regra geral^[22], os f_n pares dependem de $(a_{n\mu} + b_{n\mu})$, e os ímpares dependem apenas de $(a_{n\mu} - b_{n\mu})$.

Neste trabalho, será colocado um parâmetro (z) a mais na discretização da banda, de modo a permitir o cálculo das propriedades termodinâmicas^[23], como pode ser visto na figura 6. Os operadores f_1 e f_2 acabam não ficando com a forma dada pelas equações (1.22) e (1.23), mas ainda satisfazem

$$f_1 \propto \Lambda^{-3n/2} \quad (1.24)$$

e

$$f_2 \propto \Lambda^{-5n/2} \quad (1.25)$$

Optamos por discutir nesta dissertação o procedimento original de discretização logarítmica, pois ele tem expressões analíticas, deixando a apresentação do método mais transparente. No entanto, o uso do parâmetro de discretização z nos obriga a realizar a mudança de base dos a_{n0}, b_{n0} 's para os f_n 's numericamente. Além disso, existe um procedimento alternativo para a discretização logarítmica^[24], que vamos explicar brevemente e que, na verdade, foi o procedimento utilizado nos cálculos desse trabalho.

1.3.3 Discretização logarítmica alternativa

Na hamiltoniana discretizada em (1.18), vemos que a banda de condução está descrita por níveis discretos de energias

$$\pm \frac{(1 + \Lambda^{-1})}{2} \Lambda^{-n},$$

que correspondem aos pontos médios dos sub-intervalos da discretização. Em mais detalhe, uma energia média positiva é dada por

$$\zeta_n^{Media} = \frac{\int_{I_n} \zeta d\zeta}{\int_{I_n} d\zeta}. \quad (1.26)$$

Onde I_n é sub-intervalo $[\Lambda^{-n-1}, \Lambda^{-n}]$.

Porém, como estamos fazendo uma discretização logarítmica, uma média aritmética parece estranha. No procedimento alternativo de discretização logarítmica^[24], propõe-se que o valor das energias discretas da banda de condução em (1.18) sejam dados por médias logarítmicas nos intervalos discretos:

$$\zeta_n^{Mlog} = \frac{\int_{I_n} \zeta d \ln \zeta}{\int_{I_n} d \ln \zeta}. \quad (1.27)$$

Utilizando que $\frac{\int_{I_n} \zeta d \ln \zeta}{\int_{I_n} d \ln \zeta} = \frac{\int_{I_n} d\zeta}{\int_{I_n} \frac{1}{\zeta} d\zeta}$, é possível achar uma relação entre ζ_n^{Media} e ζ_n^{Mlog} ,

$$\zeta_n^{Mlog} = \frac{\zeta_n^{Media}}{\frac{\ln \Lambda}{2} \left(\frac{1 + \Lambda^{-1}}{1 - \Lambda^{-1}} \right)}. \quad (1.28)$$

Uma vez que as energias discretas da banda de condução são alteradas, a mudança para deixar a hamiltoniana da banda de condução tridiagonal na nova base dos f_n 's não segue mais as expressões analíticas vistas acima, sendo feita numericamente. Essa discretização alternativa é feita de modo a preservar integralmente os termos de hibridização.

Ela permite obter resultados no limite do contínuo ($\Lambda \rightarrow 1$) utilizando valores de $\Lambda \sim 10$ ^[24, 25], o que permite acelerar significativamente o cálculo, pois com menos iterações já atingimos energias baixas. No programa que implementa o grupo de renormalização numérico é utilizada essa discretização alternativa.

1.3.4 Bandas de condução par e ímpar

Além da mudança de base envolvendo os operadores de elétrons nos níveis das bandas à esquerda e à direita, é conveniente fazer uma troca para operadores pares e ímpares para facilitar os cálculos, definindo os novos operadores como:

$$f_{Pn} = \frac{\sqrt{\Gamma_L}f_{Ln} + \sqrt{\Gamma_R}f_{Rn}}{\sqrt{\Gamma_L + \Gamma_R}}, \quad (1.29)$$

$$f_{In} = \frac{\sqrt{\Gamma_R}f_{Ln} - \sqrt{\Gamma_L}f_{Rn}}{\sqrt{\Gamma_L + \Gamma_R}}. \quad (1.30)$$

Após as alterações na hamiltoniana obtém-se,

$$\begin{aligned} \frac{H}{D} = & \frac{1}{2}(1 + \Lambda^{-1}) \sum_{n=0}^{\infty} \Lambda^{-n/2} \xi_n \left(f_{Pn\sigma}^\dagger f_{P(n+1)\sigma} + f_{In\sigma}^\dagger f_{I(n+1)\sigma} + h.c \right) + \frac{\epsilon_d}{D} c_{d\sigma}^\dagger c_{d\sigma} + \frac{U_d}{D} n_{d\uparrow} n_{d\downarrow} \\ & + \left(\frac{2}{\pi D} \right)^{1/2} (\Gamma_L + \Gamma_R)^{1/2} \left(f_{P0\sigma}^\dagger c_{d\sigma} + h.c \right) + \frac{U_{L0}}{D} n_{L0\uparrow} n_{L0\downarrow} + \frac{U_{R0}}{D} n_{R0\uparrow} n_{R0\downarrow}. \end{aligned} \quad (1.31)$$

Porém, ainda não foi feita toda a troca dos operadores direita e esquerda para os operadores par e ímpar. Para facilitar a visualização será definido como ΔH o seguinte termo da equação (1.31)

$$\Delta H = \frac{U_{0L}}{D} n_{L0\uparrow} n_{L0\downarrow} + \frac{U_{0R}}{D} n_{R0\uparrow} n_{R0\downarrow}, \quad (1.32)$$

relembrando que os operadores número da equação (1.32) são construídos a partir de operadores criação e destruição dos orbitais $f_{L0\sigma}$ e $f_{R0\sigma}$, $n_{L0\sigma} = f_{L0\sigma}^\dagger f_{L0\sigma}$ e $n_{R0\sigma} = f_{R0\sigma}^\dagger f_{R0\sigma}$.

No entanto, os termos da equação (1.32) são composto de quatro operadores de criação e destruição da banda da esquerda e da direita, é conveniente deixá-los em função dos operadores pares e ímpares.

Para facilitar os cálculos será imposto que

$$\begin{aligned} \Gamma_L = \Gamma_R = \Gamma, \\ U_{0,L} = U_{0,R} = U_0, \end{aligned} \quad (1.33)$$

garantindo que a hamiltoniana tenha simetria de paridade, ou seja, uma simetria de reflexão em torno do ponto quântico. Por fim, usando as equações (1.29) e (1.30) na equação (1.32) é obtido:

$$\begin{aligned} \Delta H = \frac{U_0}{2} & \left(n_{P0\uparrow}n_{P0\downarrow} + n_{I0\uparrow}n_{I0\downarrow} + n_{I0\uparrow}n_{P0\downarrow} + n_{P0\uparrow}n_{I0\downarrow} \right. \\ & - f_{P0\uparrow}^\dagger f_{P0\downarrow}^\dagger f_{I0\uparrow} f_{I0\downarrow} - f_{P0\uparrow}^\dagger f_{I0\downarrow}^\dagger f_{I0\uparrow} f_{P0\downarrow} \\ & \left. - f_{I0\uparrow}^\dagger f_{P0\downarrow}^\dagger f_{P0\uparrow} f_{I0\downarrow} - f_{I0\uparrow}^\dagger f_{I0\downarrow}^\dagger f_{P0\uparrow} f_{P0\downarrow} \right). \end{aligned} \quad (1.34)$$

Vemos que o termo ΔH de repulsão coulombiana nos orbitais f_{0L} e f_{0R} acopla a bandas par e ímpar. Quando $U_0 = 0$, essas bandas ficam desacopladas. Como apenas a banda par se acopla ao ponto quântico, a banda ímpar pode ser eliminada dos cálculos. Para $U_0 \neq 0$, isso não ocorre mais, tornando o cálculo numérico mais pesado. A imposição de simetria de paridade, através de (1.33) não é obrigatória, mas auxilia muito na redução do tamanho das matrizes a serem diagonalizadas numericamente e por isto foi adotada.

1.4 Construção das matrizes

Com a hamiltoniana transformada para a base dos operadores $\{f_{Pn\sigma}\}$ e $\{f_{In\sigma}\}$, é possível agora fazer as preparações para encontrar os autovalores e autoestados computacionalmente. Para isso, será utilizado um método iterativo, onde o trabalho de diagonalizar a hamiltoniana será feito em etapas sucessivas para cada grupo $f_{Pn\sigma}^\dagger$ e $f_{In\sigma}^\dagger$.

Para iniciar o processo, precisamos construir analiticamente as matrizes correspondentes à etapa dos operadores $f_{P0\sigma}$ e $f_{I0\sigma}$ (chamada de etapa 0), que servirá como passo inicial para o programa que realizará o resto dos cálculos.

1.4.1 Método iterativo de diagonalização

Para resolver a hamiltoniana da equação (1.31), será definido uma sequência de hamiltonianas H_N , que são da seguinte forma:

$$\begin{aligned} H_N \equiv \Lambda^{(N-1)/2} & \left[\sum_{n=0}^{N-1} \Lambda^{-n/2} \xi_n \left(f_{Pn\sigma}^\dagger f_{P(n+1)\sigma} + f_{In\sigma}^\dagger f_{I(n+1)\sigma} + h.c \right) + \tilde{\epsilon}_d c_{d\sigma}^\dagger c_{d\sigma} + \tilde{U}_d n_{d\uparrow} n_{d\downarrow} \right. \\ & \left. + \tilde{\Gamma}^{1/2} \left(f_{P0\sigma}^\dagger c_{d\sigma} + h.c \right) + \tilde{U}_0 n_{L0\uparrow} n_{L0\downarrow} + \tilde{U}_0 n_{R0\uparrow} n_{R0\downarrow} \right] - \Delta E_N, \end{aligned} \quad (1.35)$$

onde foram definidas as seguintes variáveis:

$$\tilde{\epsilon}_d \equiv \left(\frac{2}{1 + \Lambda^{-1}} \right) \frac{U_d}{D}, \quad (1.36)$$

$$\tilde{U}_d \equiv \left(\frac{2}{1 + \Lambda^{-1}} \right) \frac{U_d}{D}, \quad (1.37)$$

$$\tilde{U}_0 \equiv \left(\frac{2}{1 + \Lambda^{-1}} \right) \frac{U_d}{D}, \quad (1.38)$$

$$\tilde{\Gamma} \equiv \left(\frac{2}{1 + \Lambda^{-1}} \right)^2 \frac{2(\Gamma_L + \Gamma_R)}{\pi D}. \quad (1.39)$$

O termo ΔE_N tem como finalidade garantir que a energia do estado fundamental de H_N seja zero, de modo que as energias medidas sejam relativas ao estado fundamental.

Desse modo, a aproximação discretizada de H , hamiltoniana da equação (1.31), pode ser escrita como um limite na forma de

$$H = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{1}{2} (1 + \Lambda^{-1}) D \Lambda^{-(N-1)/2} H_N + \Delta E_N \right). \quad (1.40)$$

Vale observar que o fator $\Lambda^{(N-1)/2}$ introduzido na equação (1.35) tem o propósito de fazer as menores energias de excitação em H_N da ordem de 1, pois essas energias são da ordem do coeficiente do termo $(f_{N\sigma}^\dagger f_{N+1\sigma} + f_{N+1\sigma}^\dagger f_{N\sigma})$. Como se espera que ξ_N seja da ordem de 1 para N grandes, a informação sobre os níveis de H (hamiltoniana original) com energias $\sim \Lambda^{-(N-1)/2} D$, pode ser obtida trabalhando-se com os autoestados de H_N (hamiltoniana reescalada) de energia ~ 1 .

O método consiste em reescrever as hamiltonianas da equação (1.35) através da relação de recorrência, em outras palavras, a partir de H_N , é possível encontrar H_{N+1} apenas adicionando os operadores $f_{I(N+1)}$ e $f_{P(N+1)}$.

Com a relação de recorrência, é possível obter os autovetores e autovalores de H_{N+1} conhecendo previamente os autovalores e autovetores de H_N . De uma iteração para outra, a escala é aumentada de modo que o menor autovalor encontrado é sempre ~ 1 . Esse procedimento iterativo é um método para se resolver hamiltonianas que possuem termos quárticos, como a hamiltoniana do modelo de Anderson.

Para descrever melhor o que foi dito acima, será dado um exemplo de como é possível encontrar os autoenergia e autoestados de uma hamiltoniana H_{N+1} a partir de H_N , num caso mais simples, onde apenas é preciso adicionar um operador f_{N+1} , sem paridade. Nesse caso, a relação de recorrência é dada por:

$$H_{N+1} = \Lambda^{1/2} H_N + \xi_N (f_{N\sigma}^\dagger f_{N+1\sigma} + f_{N+1\sigma}^\dagger f_{N\sigma}). \quad (1.41)$$

Toma-se $|l, N\rangle$, com $(l = 0, 1, 2, \dots, L_N)$, como sendo os autoestados de H_N , onde $l = 0$ corresponde ao estado fundamental. Como H_N é construído a partir dos operadores $c_{d\sigma}$, $f_{0\sigma}$, $f_{1\sigma}, \dots, f_{N\sigma}$, é visível que H_N contém $2(N + 2)$ operadores de férmions ao se

considerar os spins. Como os operadores de férmions podem ser encontrados apenas em dois estados (com ou sem elétrons), L_N será dado por $(2^{2(N+2)} - 1)$.

Sendo conhecidos os níveis de energia, $E(l, N)$, e os elementos de matriz, $\langle l, N | f_{n\sigma} | l', N \rangle$, é possível construir os seguintes quatro estados a partir do estado $|l, N\rangle$:

$$\begin{aligned} |1; l, N\rangle &\equiv |l, N\rangle, \\ |2; l, N\rangle &\equiv f_{N+1\uparrow}^\dagger |l, N\rangle, \\ |3; l, N\rangle &\equiv f_{N+1\downarrow}^\dagger |l, N\rangle, \\ |4; l, N\rangle &\equiv f_{N+1\uparrow}^\dagger f_{N+1\downarrow}^\dagger |l, N\rangle. \end{aligned} \quad (1.42)$$

Como H_N tinha $L_N + 1$ estados, tem-se que essa nova base possui $4(L_N + 1)$ estados ortogonais. De forma que é possível calcular os elementos de matriz de H_{N+1} nessa nova base, aplicando os estados $\langle i'; l', N |$ e $|i; l, N\rangle$ de cada lado da equação (1.41).

Diagonalizando a hamiltoniana (1.41), geramos os novos autoestados $|l, N+1\rangle$, com $(l = 0, 1, 2, \dots, L_{N+1})$, e as autoenergias $E(l, N+1)$ da hamiltoniana H_{N+1} . Os autovalores são deslocados de modo a fazer a energia do estado fundamental igual a zero. É possível aplicar o mesmo procedimento para resolver a H_{N+2} a partir da solução de H_{N+1} e assim por diante.

No problema estudado aqui, existem dois conjuntos de operadores, $\{f_{Pn\sigma}\}$ e $\{f_{In\sigma}\}$. Dessa forma, a relação de recorrência é utilizada com uma modificação. A iteração $N + 1$ é dividida em duas partes, primeiro adicionamos o estado $f_{I, N+1}$, gerando a hamiltoniana

$$H_{I(N+1)} = \Lambda^{1/4} H_N + \Lambda^{-1/4} \xi_N (f_{IN\sigma}^\dagger f_{IN+1\sigma} + f_{IN+1\sigma}^\dagger f_{IN\sigma}), \quad (1.43)$$

cujos elementos de matriz são calculados como explicado acima e seus autovetores e autovalores são determinados. A partir daí, introduzimos o estado $f_{P, N+1}$, gerando a hamiltoniana

$$H_{P(N+1)} = \Lambda^{1/4} H_{I(N+1)} + \xi_N (f_{PN\sigma}^\dagger f_{PN+1\sigma} + f_{PN+1\sigma}^\dagger f_{PN\sigma}). \quad (1.44)$$

que é então diagonalizada como descrito acima, completando a iteração $N + 1$.

Como o número de estados cresce exponencialmente, a partir de uma certa iteração é necessário introduzir uma energia de corte e descartar todos os estados com energia maior do que esse valor de corte. Quanto maior a energia de corte, mais preciso é o cálculo, mas a quantidade de memória necessária e o tempo de execução crescem rapidamente, principalmente se tivermos duas bandas de condução. A idéia é realizar diferentes cálculos com energias de corte sucessivamente maiores até se perceber que o aumento da energia de corte já não influencia mais o cálculo das propriedades físicas. Quando discutirmos o cálculo das propriedades termodinâmicas, voltaremos a esse ponto.

Dessa forma, para iniciar o método iterativo, é apenas preciso ter uma hamiltoniana inicial cujos autovalores e autoestados sejam previamente conhecidos, no caso deste trabalho será dado o nome de H_0 para essa hamiltoniana da etapa zero.

1.4.2 Hamiltoniana da Etapa 0

Nesta seção, será construída a hamiltoniana H_0 que serve de ponto inicial para o método iterativo do Grupo de Renormalização Numérico. A forma como H_0 será criada é semelhante ao que foi feito na subseção 1.4.1, será usado uma hamiltoniana mais fundamental que ela, de modo que H_0 surja ao adicionar os operadores f_0 a uma hamiltoniana H_{-1} , que apenas dependa de operadores do ponto quântico.

Logo, para isso, é preciso criar uma hamiltoniana H_{-1} que não tenha nenhuma dependência com operadores das bandas. Como se espera chegar na equação (1.35), H_{-1} pode ser escrito como:

$$H_{-1} = \Lambda^{-1} \left(\tilde{\epsilon}_d c_{d\sigma}^\dagger c_{d\sigma} + \tilde{U}_d n_{d\uparrow} n_{d\downarrow} \right), \quad (1.45)$$

que é a hamiltoniana da impureza isolada, sem banda de condução e sem hibridização, normalizada de modo que respeite a equação (1.35).

Utilizando a relação de recorrência, a hamiltoniana da etapa 0 tem a forma

$$H_0 = \Lambda^{-1/2} H_{-1} + \Lambda^{-1/2} \left[\tilde{\Gamma}^{\frac{1}{2}} \left(f_{P0\sigma}^\dagger c_{d\sigma} + c_{d\sigma}^\dagger f_{P0\sigma} \right) + \tilde{U}_0 n_{L0\uparrow} n_{L0\downarrow} + \tilde{U}_0 n_{R0\uparrow} n_{R0\downarrow} \right]. \quad (1.46)$$

Porém, para iniciar o método iterativo e encontrar as hamiltonianas H_N , é necessário conhecer os autovalores e autoestados de H_0 . Por isso foi importante construir primeiro a hamiltoniana H_{-1} , pois a partir dela será possível encontrar os autoestados e autovalores de H_0 pelo método iterativo, calculando-se analiticamente seus elementos de matriz.

Mas antes de encontrar os autovalores de H_{-1} serão aproveitadas as simetria das hamiltonianas para facilitar os cálculos. Todas as hamiltonianas H_N trabalhadas conservam spin, isto é, comutam com

$$\vec{S}_N \equiv \frac{1}{2} \sum_{n=0}^N f_{Pn\sigma}^\dagger \vec{\sigma}_{\sigma\nu} f_{Pn\nu} + \frac{1}{2} \sum_{n=0}^N f_{In\sigma}^\dagger \vec{\sigma}_{\sigma\nu} f_{In\nu} + c_{d\sigma}^\dagger \vec{\sigma}_{\sigma\nu} c_{d\nu}, \quad (1.47)$$

onde $\vec{\sigma}(\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ são as matrizes de Pauli. Além disso, conservam o número de elétrons. O operador número será trocado pelo operador mais conveniente definido como carga, dado por

$$Q_N \equiv \sum_{n=0}^N (f_{Pn\sigma}^\dagger f_{Pn\sigma} + f_{In\sigma}^\dagger f_{In\sigma} - 1) + (c_{d\sigma}^\dagger c_{d\sigma} - 1). \quad (1.48)$$

Por exemplo, no caso do H_{-1} , tem-se que $c_{d\sigma}^\dagger c_{d\sigma}$ é o operador número de elétrons da impureza subtraindo 1, de forma que com zero elétrons $Q_{-1} = -1$, com 1 elétron $Q_{-1} = 0$ e com 2 elétrons $Q_{-1} = 1$.

Como mencionamos anteriormente, consideramos uma hamiltoniana que também tem simetria de reflexão em torno do ponto quântico, de modo que seus autoestados possuem paridade p bem definida. Como as autofunções de H_N também são autofunções de Q_N , $(S_N)^2$ e S_{Nz} , é possível utilizar os números quânticos Q , S , S_z e p como os números quânticos que identificam as autofunções. Porém, os autovalores independem de S_z , de modo que é possível considerar apenas Q , S e p ao se construir os estados [9].

A motivação é ao construir os estados, esses possam ser organizados de acordo com os valores de Q , S e de sua paridade ($p = \text{par}$ ou ímpar). Desse modo, os estados construídos não poderão ter elementos de matriz com estados que têm diferentes valores para (Q, S, p) , assim é possível diagonalizar separadamente subespaços com os mesmos valores de (Q, S, p) .

Considerando o que foi escrito acima, é possível gerar os estados da hamiltoniana H_{-1} , criando um espaço de autofunções a partir do vazio $|\emptyset\rangle$. Seguem as autofunções e autovalores de H_{-1} :

$$\begin{aligned} |\emptyset\rangle &\longrightarrow E = 0 & c_{d\downarrow}^\dagger |\emptyset\rangle &\longrightarrow E = \Lambda^{-1}\tilde{\epsilon}_d \\ c_{d\uparrow}^\dagger |\emptyset\rangle &\longrightarrow E = \Lambda^{-1}\tilde{\epsilon}_d & c_{d\uparrow}^\dagger c_{d\downarrow}^\dagger |\emptyset\rangle &\longrightarrow E = \Lambda^{-1}(2\tilde{\epsilon}_d + U_d). \end{aligned} \quad (1.49)$$

O método aqui tratado pode ser melhor compreendido utilizando o diagrama da figura 5. Esse diagrama resume o trabalho realizado no decorrer dessa seção, os círculos representam os subespaços $(Q, S, p = \text{par})$ da hamiltoniana H_{-1} (todos autoestados pares) com setas indicando qual a origem dos subespaços de H_0 , dados por quadrados. De modo que é possível ver qual subespaço $(Q, S, p = \text{par})$ de H_{-1} contribui para a criação dos estados de H_0 , quando forem adicionados os operadores do nível $f_{0,I\sigma}$.

E tendo a base nova, é possível aplicar o mesmo método adicionando os operadores $f_{0,P\sigma}$ para conseguir uma base completa com operadores tanto ímpares quanto pares para a hamiltoniana H_0 .

Para poder alimentar o programa que realiza o Grupo de Renormalização Numérico com os autovalores e autoestados da hamiltoniana H_0 , o procedimento discutido acima foi feito analiticamente para se obter todos as matrizes dos subespaços (Q, S, p) de H_0 . As matrizes foram diagonalizadas através de um programa feito em *Fortran* utilizando a biblioteca de sub-rotinas *LAPACK*[26]. Segue no apêndice B as tabelas com os vetores da base de H_0 separados em paridade e subespaços de Q e S , e ao lado dos vetores estão as respectivas matrizes de H_0 nessa nova base.

1.4.3 Invariantes

Para facilitar os cálculos numéricos, além de construir as matrizes dos subespaços de Q, S, p é interessante montar também matrizes conhecidas como invariantes.

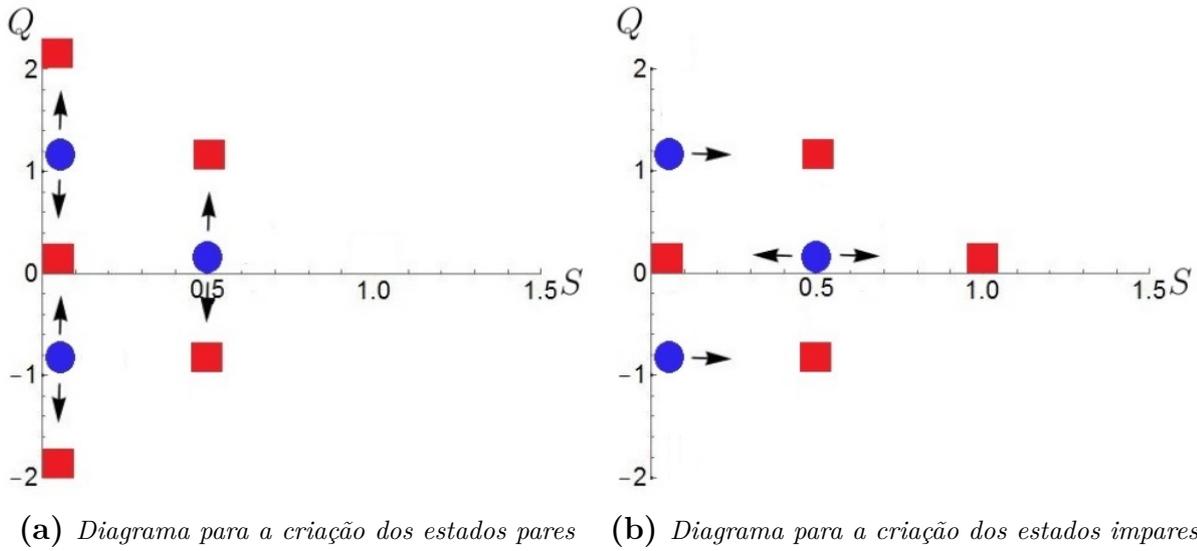


Figura 5 – Diagrama para a criação dos estados de H_0 , acrescentando os operadores do nível $f_{0,I\sigma}$ nos estados de H_{-1} . No diagrama (5a) temos a criação dos estados pares, no diagrama (5b) a criação dos estados ímpares.

O teorema de Wigner-Eckart [27] faz parte da teoria da representação e da mecânica quântica. Ele afirma que os elementos de matriz dos operadores tensoriais irredutíveis com base em valores próprios do momento angular podem ser expressos como o produto de dois fatores, um dos quais é independente da orientação do momento angular, que é chamado aqui de invariante, e o outro um coeficiente Clebsch-Gordan.

$$\langle S S_z | T_q^{(k)} | S' S'_z \rangle = \langle S || T^{(k)} || S' \rangle \langle S' S'_z ; k q | S S_z \rangle. \quad (1.50)$$

Nesse caso, $T_q^{(k)}$ será dado por $f_{n,P,\sigma}$, $f_{n,I,\sigma}$ e $c_{d,\sigma}$, onde temos as seguintes relações:

$$T_{-\frac{1}{2}}^{(\frac{1}{2})} = f_{n,p,\uparrow}, \quad (1.51)$$

$$T_{\frac{1}{2}}^{(\frac{1}{2})} = -f_{n,p,\downarrow}, \quad (1.52)$$

com $p = P, I$. Equações análogas às (1.51) e (1.52) podem ser contruídas para os operadores $c_{d,\sigma}$.

O nome deriva dos físicos Eugene Wigner e Carl Eckart, que desenvolveram o formalismo como uma ligação entre os grupos de transformação de simetria do espaço (aplicado às equações de Schrödinger) e as leis de conservação de energia, momento e momento angular.

A vantagem é que os autovalores independem do número quântico S_z de spin nem da componente σ do operador $f_{n,p,\sigma}$ (ou $c_{d,\sigma}$) de modo que para facilitar as contas é possível usar $S_z = S$ para o cálculo dos autovetores. Desse modo, é mais útil utilizar para o cálculo da etapa seguinte os invariantes $\langle j || T^{(k)} || j' \rangle$.

Assim, o invariante é calculado invertendo a equação (1.50),

$$\langle j || T^{(k)} || j' \rangle = \frac{\langle j m | T_q^{(k)} | j' m' \rangle}{\langle j' m' ; k q | j m \rangle}. \quad (1.53)$$

Juntamente com os elementos de matriz da hamiltoniana da etapa 0, os invariantes dos operadores c_d , $f_{0,P}$ e $f_{0,I}$ da etapa 0 também foram calculados de forma analítica e depois colocadas na base dos autoestados de H_0 pelo programa em *Fortran* que diagonaliza H_0 , assim os invariantes da etapa 0 também entram como condição inicial no programa feito em *C++* que realizará o método do Grupo de Renormalização Numérico. As matrizes invariantes das etapas seguintes são calculadas pelo próprio programa escrito em *C++* para serem utilizadas pelo mesmo.

Parte II

Apresentação dos Resultados

2 Propriedades termodinâmicas

O objetivo é calcular a contribuição do ponto quântico às propriedades termodinâmicas do sistema em função da temperatura. Como já foi discutido nas seções anteriores, o programa que realiza o Grupo de Renormalização Numérico consegue gerar os autovalores da hamiltoniana do sistema, dessa forma o próximo passo é discutir como será feita a dependência com a temperatura para gerar os gráficos.

Análogo ao que acontece com os autovalores da hamiltoniana na equação (1.40), no lugar de $\beta = 1/k_B T$ será usado $\bar{\beta}$, que vem do reescalonamento das energias,

$$\frac{k_B T}{D} = \frac{1}{2}(1 + \Lambda^{-1})\Lambda^{-(N-1)/2}\frac{1}{\bar{\beta}}, \quad (2.1)$$

ou seja,

$$\bar{\beta} = \frac{1}{2}(1 + \Lambda^{-1})D\Lambda^{-(N-1)/2}\beta. \quad (2.2)$$

Em uma iteração N , devemos escolher uma faixa de $\bar{\beta}$ de tal modo que as correspondentes temperaturas não sejam muito altas, ou seja o valor mínimo de $\bar{\beta}$ depende da energia de corte adotada. Se ficássemos com temperaturas muitas altas na interação N , precisaríamos reter estados com auto-valores altos para os quais o fator de Boltzmann ainda não fosse desprezível.

Por outro lado, desde que estamos na iteração N , nossa cadeia é truncada, e não temos ainda determinado acuradamente a parte do espectro com energias menores do que $\Lambda^{-(N-1)/2}$, dessa forma, a temperatura mínima deve ser maior do que esse valor para garantir que seja calculada de maneira correta. Portanto, o intervalo de $\bar{\beta}$ fica da seguinte forma:

$$[\bar{\beta}_{min}, \sqrt{\Lambda}\bar{\beta}_{min}].$$

$\bar{\beta}_{min}$ é um parâmetro de entrada do programa. Assim é possível escolher um $\bar{\beta}_{min}$, que permita fazer a melhor ligação entre iterações sucessivas, já que cada iteração N terá seu intervalo de temperatura e queremos unir suavemente todas as iterações para poder gerar um gráfico da propriedade termodinâmica em função da temperatura.

Aqui vale ressaltar outro dado que entra como condição inicial do programa, o parâmetro z ^[23]. Esse parâmetro permite criar uma generalização da discretização logarítmica, como ilustrado na figura (6).

A motivação para a inclusão do parâmetro z aparece quando são construídos os gráficos. Com valores grandes de Λ , se por um lado garantimos que a temperatura mínima seja bem maior que o espectro das menores energias no intervalo N , é criado outro

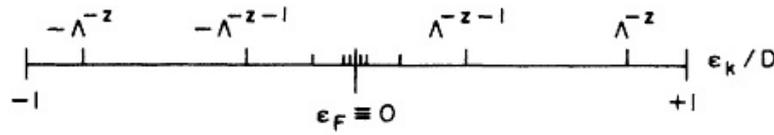


Figura 6 — Imagem ilustrativa da discretização logarítmica da banda feita com o parâmetro z ^[23]. O parâmetro z cria uma generalização da discretização logarítmica, possibilitando resolver o problema da oscilação das propriedades termodinâmicas para Λ grande.

problema, as propriedades termodinâmicas são funções que apresentam oscilações na sua dependência com a temperatura, e a amplitude dessas oscilação cresce com $e^{-\pi^2/\ln\Lambda}$ ^[23]. Porém, utilizando a discretização logarítmica da figura 6, é obtido que propriedades termodinâmicas calculadas com diferentes valores de z possuem oscilações com fases diferentes^[23], o que torna possível remover as oscilações somando resultados obtidos com diferentes valores de z .

Deste modo, agora as propriedades termodinâmicas serão funções da temperatura e do parâmetro z ($f(T, z)$), será usado o fato que dois valores de z diferentes gerarão o mesmo gráfico com a mesma oscilação desde que esses valores de z sejam defasados exatamente por 1. Já que quando a diferença entre dois z diferentes é exatamente 1, é equivalente a retirar os intervalos das extremidades da discretização logarítmica da figura 6. Na prática, curvas com dois valores de z que diferenciam por $\frac{1}{2}$ cancelam suas oscilações.

Nesse trabalho, para anular as oscilações, serão usados 4 valores do parâmetro z (0.25, 0.5, 0.75 e 1). Na prática, isso equivale a rodar o programa do Grupo de Renormalização 4 vezes diferentes para no fim realizar uma média das propriedades termodinâmicas obtidas com cada z . Os cálculos realizados de forma detalhada de como é a dependência das propriedades com o parâmetro z e como estas oscilam pode ser encontrado nas referências^[23, 28].

Retornando para o cálculo dos $\bar{\beta}$'s, obtido o $\bar{\beta}_{min}$ e tendo o intervalo que se deseja ter as temperaturas, é possível criar uma função que gere, por exemplo, 100 pontos de temperatura para serem usados no gráfico. A fórmula para criar os 100 $\bar{\beta}$'s diferentes foi a seguinte:

$$\bar{\beta}_i = \bar{\beta}_{min} \Lambda^{(i-1)/100} \Lambda^{z-1}, \quad (2.3)$$

sendo $1 \leq i \leq 100$.

No entanto, no momento de realizar a média em z das propriedades, é escolhida uma faixa de 50 pontos, em correspondência com o intervalo $[\bar{\beta}_{min}, \sqrt{\Lambda} \bar{\beta}_{min}]$ para os $\bar{\beta}$'s. A razão para gerar 100 pontos e depois escolher uma faixa com 50 é para ter flexibilidade e poder ajustar a escolha dessas faixas de modo conseguir uma curva suave, isto é, de modo que a propriedade termodinâmica calculada no fim da faixa em uma iteração N case tão suavemente quanto possível com a propriedade termodinâmica calculada no início da

faixa na iteração $N + 1$.

2.1 Cálculo das propriedades termodinâmicas

O primeiro passo para calcular a contribuição do ponto quântico às propriedades termodinâmicas é calcular as propriedades termodinâmicas das bandas de condução sem o ponto quântico.

Dessa forma, é necessário encontrar as autoenergias das bandas de condução para realizar o cálculo, a hamiltoniana da banda de condução sem o ponto quântico tem uma forma simples de uma matriz tri-diagonal na base dos f_n e pode ser diagonalizada usando um programa capaz de diagonalizar matrizes simétricas.

Com as autoenergias e as temperaturas, é possível calcular as propriedades termodinâmicas da banda de condução.

Para tanto, será usada a distribuição de Fermi-Dirac do auto-valor ϵ_j , que tem a forma de:

$$f(\epsilon_j) = \frac{1}{1 + e^{\bar{\beta}\epsilon_j}}. \quad (2.4)$$

Onde a $\tilde{\epsilon}_j$ é a auto-energia renormalizada:

$$\epsilon_j = \frac{1}{2}(1 + \Lambda^{-1})D\Lambda^{-(N-1)/2}\tilde{\epsilon}_j. \quad (2.5)$$

Analisando como foram definidas as autoenergias na equação (2.5) e os $\bar{\beta}$ na equação (2.2), é visível que $\bar{\beta}\tilde{\epsilon}_j = \beta\epsilon_j$, já que os termos de reescalonamento se anulam. Possibilitando o cálculo das propriedades termodinâmicas com os autovalores tirados direto da matriz diagonalizada no programa.

As propriedades calculadas foram: entropia, suscetibilidade magnética e calor específico. Onde cada propriedade foi calculada com as 100 temperaturas geradas pela equação (2.3), para esse cálculo foram usadas as seguintes fórmulas^[28]:

Suscetibilidade magnética:

$$\frac{k_B T \chi_0}{(g\mu_B)^2} = \frac{1}{2} \sum_j f(\epsilon_j)(1 - f(\epsilon_j)), \quad (2.6)$$

Função partição:

$$Z_0 = \prod_j (1 + e^{-\bar{\beta}|\tilde{\epsilon}_j|}), \quad (2.7)$$

Entropia:

$$\frac{S_0}{k_B} = \log Z_0 + \bar{\beta} \sum_j \frac{\tilde{\epsilon}_j e^{-\bar{\beta}\tilde{\epsilon}_j}}{Z_0}, \quad (2.8)$$

Calor específico:

$$C_0 = 2\bar{\beta} \sum_j \tilde{\epsilon}_j^2 f(\tilde{\epsilon}_j) (1 - f(\tilde{\epsilon}_j)), \quad (2.9)$$

onde foi usado que g é o fator giromagnético e μ_B é o magneton de Bohr.

Com os dados referentes às propriedades termodinâmicas da banda de condução, as propriedades termodinâmicas do sistema completo são calculadas com o programa do Grupo de Renormalização Numérico utilizando as seguintes fórmulas:

Susceptibilidade magnética

$$\frac{k_B T \chi}{(g\mu_B)^2} = \frac{1}{3} \sum_n S_n(S_n + 1) e^{\beta E_n} / Z, \quad (2.10)$$

Função partição:

$$Z_0 = \sum_n e^{-\beta E_n}, \quad (2.11)$$

Entropia:

$$S = k_B \ln(Z) + \frac{1}{T} \sum_n E_n e^{-\beta E_n} / Z, \quad (2.12)$$

Calor específico:

$$C = T \frac{\partial S}{\partial T} = \frac{1}{k_B T^2} \left[\sum_n E_n^2 e^{-\beta E_n} / Z - \left(\sum_n E_n e^{-\beta E_n} / Z \right)^2 \right], \quad (2.13)$$

onde foi usado que S_n é o spin total do estado n , o qual possui energia E_n em relação à energia do estado fundamental.

Por fim, é possível calcular a contribuição do ponto quântico às propriedades termodinâmicas fazendo a subtração do valor da propriedade do sistema completo pelo valor da propriedade da banda de condução sem a impureza, já que o sistema todo tem contribuição tanto da banda livre como do ponto quântico no cálculo das suas propriedades. O cuidado que deve ser tomado é que a subtração deve ser feita nos mesmos valores de $\bar{\beta}$. Para garantir que não ocorra erros, foi criado um programa em *Fortran* que realiza essa tarefa, além de fazer a média no parâmetro z e gerar os dados para criar os gráficos sem oscilações.

A descrição do procedimento feita acima corresponde à situação mais comum de uma única banda de condução. No caso de haver duas bandas, devemos considerar as duas contribuições de banda livre.

Outro aspecto muito importante de ser levado em conta é o de que, com a repulsão coulombiana nos estados $f_{0,L}$ e $f_{0,R}$, mesmo o Hamiltoniano sem a impureza é quártico, logo não podemos resolvê-lo calculando níveis de uma única partícula. Nesse caso, a propriedade termodinâmica do sistema sem a impureza também é calculada através do programa de muitos corpos, empregando o procedimento iterativo descrito anteriormente, apenas se tomando o cuidado de remover a impureza do problema. Isso pode ser feito facilmente, escolhendo-se uma energia ϵ_d bem alta, de modo que todos os estados da impureza, exceto o de impureza vazia, serão cortados.

Para entender melhor os dados gerados, na próxima seção será feito um breve resumo do conceito de pontos fixos aplicados no contexto do Grupo de Renormalização Numérico.

2.2 Pontos fixos

Uma parte importante para compreender a teoria do Grupo de Renormalização Numérico é o conceito de pontos fixos. Ponto fixo de uma função é definido como o elemento do domínio dessa função que é mapeado nele mesmo, em outras palavras, temos que c é um ponto fixo da função $f(x)$ se $f(c) = c$. A ideia de ponto fixo não fica limitada apenas a funções, sendo possível aplicar o raciocínio em diversas áreas, no caso deste trabalho será feito um breve estudo de pontos fixos de transformações, mais especificamente a transformação do Grupo de Renormalização Numérico. Esta seção foi baseada no estudo sobre pontos fixos no artigo de Krishna-murthy^[9].

Para facilitar a análise dos pontos fixos, será usada a hamiltoniana do problema com apenas uma banda de elétrons. Assim, utilizando a equação (1.41), a transformação que relaciona H_N com H_{N+1} do problema onde existe apenas uma banda, cria-se uma nova relação de recorrência ligando as duas:

$$H_{N+1} = \Lambda^{1/2} H_N + \xi_N (f_{N\sigma}^\dagger f_{N+1\sigma} + f_{N+1\sigma}^\dagger f_{N\sigma}) - E_{G,N+1}, \quad (2.14)$$

onde $E_{G,N+1}$ é escolhido de modo que a energia do estado fundamental de H_{N+1} seja zero. A equação (2.14) é um exemplo de uma Transformação de Grupo de Renormalização. Definindo \mathcal{T} como a representação simbólica da transformação, é possível reescrever a equação (2.14),

$$H_{N+1} = \mathcal{T}[H_N]. \quad (2.15)$$

A transformação \mathcal{T} recebe como dados de entrada os autovalores de H_N e $\langle l', N | f_{N\sigma} | l, N \rangle$ e entrega como dados de saída os autovalores de H_{N+1} e $\langle l', N+1 | f_{N+1\sigma} | l, N+1 \rangle$ utilizando a diagonalização iterativa descrita na seção 1.4.1.

Nesse contexto, um ponto fixo de uma transformação \mathcal{F} é uma hamiltoniana que permanece invariante à \mathcal{F} ($\mathcal{F}[H^*] = H^*$). No entanto, \mathcal{T} propriamente dito não possui nenhum ponto fixo. Quem possui pontos fixos é na verdade \mathcal{T}^2 , duas aplicações seguidas de \mathcal{T} , que leva H_N até H_{N+2} e também é uma Transformação de Grupo de Renormalização.

Numericamente, um ponto fixo de \mathcal{T} é um conjunto de níveis de energia e elementos de matriz de f_N , que são repetidos quando é feita a diagonalização iterativa duas vezes seguidas. Em outras palavras, a hamiltoniana muda muito pouco sobre uma transformação de Grupo de Renormalização se ela estiver perto de um ponto fixo dessa transformação. Assim sendo, uma forma de reconhecer pontos fixos dos resultados numéricos é procurar por conjuntos de níveis de energia, que mudam muito pouco de uma iteração N para uma iteração $N+2$.

Para melhor ilustrar o que foi escrito, será usada a hamiltoniana da banda de condução, que pode ser conseguida da equação (1.20) retirando as partes referentes ao ponto quântico:

$$H_N^{BC} = \sum_{n=0}^{N-1} \Lambda^{(N-1-n)/2} \xi_n (f_{n\sigma}^\dagger f_{n+1\sigma} + f_{n+1\sigma}^\dagger f_{n\sigma}), \quad (2.16)$$

de forma que a equação de H_N^{BC} acima satisfaz a relação de recorrência da equação (2.14), assumido que as energias do estado fundamental sejam subtraídas.

Analisando os autovalores da matriz \mathcal{H}_N^{BC} , obtidos numericamente no capítulo anterior. A simetria partícula buraco de H_N^{BC} faz com que se η é um autovalor de \mathcal{H}_N^{BC} , também é $-\eta$. A consequência disso é que se $N+1$ é par, existe $\frac{1}{2}(N+1)$ positivos autovalores, que serão denotados por η_j , com $j = 1, 2, \dots, \frac{1}{2}(N+1)$, os outros autovalores são apenas esse conjunto negativo.

Quando $N+1$ é ímpar, tem-se que existe um autovalor zero, denotado de $\hat{\eta}_0$, e outros $\frac{1}{2}N$ autovalores positivos, que serão escritos como $\hat{\eta}_j$, $j = 1, 2, \dots, \frac{1}{2}N$, como no outro caso, os outros $\frac{1}{2}N$ são seus negativos. Segue Tabela 1 abaixo com os valores dos η_j e $\hat{\eta}_j$ para $\Lambda = 2.5$.

O que é encontrado calculando os autovalores de η_j e $\hat{\eta}_j$ numericamente para um dado Λ , é que com N aumentando, os valores rapidamente se aproximam de um conjunto de valores η_j^* e $\hat{\eta}_j^*$. Para $j \gg 1$ esses valores são:

$$\eta_j^* = \Lambda^{j-1}, \quad (2.17)$$

j	1	2	3	4	5	6	
η_j	0.74689	2.49322	6.24999	15.62500	39.06250	97.65625	$(N + 1) = 12$
$\hat{\eta}_j$	1.52049	3.95255	9.88212	24.70529	61.76324	154.40809	$(N + 1) = 13$

Tabela 1 – Lista dos valores^[9] de η_j e $\hat{\eta}_j$ para $\Lambda = 2.5$. Onde η_j indica os autovalores quando $N + 1$ é par e $\hat{\eta}_j$ para quando $N + 1$ é ímpar.

$$\hat{\eta}_j^* = \Lambda^{j-1/2}. \quad (2.18)$$

Como exemplo da equação (2.17), com $\Lambda = 2.5$ e $j = 3$, obtém-se $\Lambda^{3-1} = 6.25$, que é muito próximo do valor encontrado na Tabela 1.

Deste modo, obtém-se que os conjuntos η_j^* e $\hat{\eta}_j^*$ e seus operadores de elétrons e buracos associados definem duas distintas hamiltonianas de pontos fixos do operador \mathcal{T}^2 . A hamiltoniana de ponto fixo associado com os pares será H^* e com os ímpares \widehat{H}^* . O resultado é que fazendo $N \rightarrow \infty$, H_N^{BC} vai para H^* se $N + 1$ é par ou para \widehat{H}^* se $N + 1$ é ímpar.

Compreendido o conceito de ponto fixo, é possível aplicar no caso do modelo de Anderson simétrico. O modelo simétrico não é nada mais que é a equação (1.35) com

$$2\tilde{\epsilon}_d + \tilde{U}_d = 0, \quad (2.19)$$

de modo que as configurações da impureza vazia e duplamente ocupadas possuem energia igual a zero, garantindo a simetria partícula-buraco. A menos de uma constante, ficamos com a hamiltoniana

$$H_N = \Lambda^{(N-1)/2} \left[\sum_{n=0}^{N-1} \Lambda^{-n/2} \xi_n (f_{n\sigma}^\dagger f_{n+1\sigma} + f_{n+1\sigma}^\dagger f_{n\sigma}) + \tilde{\Gamma}^{1/2} (f_{0\sigma}^\dagger c_{d\sigma} + c_{d\sigma}^\dagger f_{0\sigma}) + \tilde{U}_d (c_{d\sigma}^\dagger c_{d\sigma} - 1)^2 \right]. \quad (2.20)$$

O objetivo é conseguir encontrar todos os pontos fixos a partir de valores especiais de $\tilde{\Gamma}$ e \tilde{U}_d . O primeiro caso mais simples é tomar ambos $\tilde{\Gamma} = 0$ e $\tilde{U}_d = 0$.

A hamiltoniana criada desta forma, $H_{N,BC}$, é apenas a hamiltoniana da banda de condução, H_N^{BC} , mais um orbital de impureza de energia zero e sem hibridização com outros níveis (impureza livre). Como H_N^{BC} vai rapidamente para seu ponto fixo com $N \rightarrow \infty$, aparecem dois novos pontos fixos, H_{FO}^* e \widehat{H}_{FO}^* . Esses novos pontos fixos são apenas H^* e \widehat{H}^* somando o orbital livre da impureza. Vale observar que como nível da impureza tem

quatro estados degenerados (vazio, \uparrow , \downarrow e $\uparrow\downarrow$), cada estado de H^* pode gerar quatro de H_{FO}^* .

O próximo ponto fixo estudado é conhecido com ponto fixo de momento localizado. Fazendo $\tilde{\epsilon}_d + \tilde{U}_d \gg \tilde{\Gamma}$, onde $\tilde{\epsilon}_d < 0$. Nessa nova configuração não existe mais degenerescência dos quatro estados do nível da impureza como no caso anterior, agora os estados \uparrow e \downarrow (degenerados) tem menor energia que o estado vazio e duplamente ocupado, $\uparrow\downarrow$. Assim, o que acontece é que a impureza tornou-se um "momento local" de spin- $\frac{1}{2}$. A hamiltoniana fica:

$$H_N = \Lambda^{(N-1)/2} \left[\sum_{n=0}^{N-1} \Lambda^{-n/2} \xi_n (f_{n\sigma}^\dagger f_{n+1\sigma} + f_{n+1\sigma}^\dagger f_{n\sigma}) + \frac{\tilde{\Gamma}}{\tilde{U}_d} (f_{0\sigma}^\dagger \vec{\sigma}_{\sigma\nu} f_{0\nu}) \cdot \vec{\tau} \right], \quad (2.21)$$

onde o termo $\vec{\tau}$ adicionado vem do operador $c_{d\sigma}^\dagger \vec{\sigma}_{\sigma\nu} c_{d\nu}$ agir exatamente como um operador de Pauli associado ao spin- $\frac{1}{2}$, aqui definida como $\vec{\tau}$. Essa hamiltoniana é a mesma que Wilson considerou no caso do modelo Kondo^[20], mostrando assim que o modelo de Anderson pode ser reduzido ao modelo Kondo tomando os parâmetros mencionados acima.

A hamiltoniana da equação (2.21) será definida como $H_{N,LM}$, que no fim é apenas a hamiltoniana da banda de condução, H_N^{BC} , mais um spin- $\frac{1}{2}$ localizado. Desse modo é possível definir dois pontos fixos para \mathcal{T}^2 , H_{LM}^* e \widehat{H}_{LN}^* . Análogo ao que foi feito antes, é possível construir de cada estado de H^* e \widehat{H}^* , dois estados de H_{ML}^* e \widehat{H}_{LM}^* , combinando os estados degenerados dos spins \uparrow e \downarrow . Assim, com $N \rightarrow \infty$, $H_{N,LM}$ vai para H_{LM}^* se $N+1$ é par e para \widehat{H}_{LM}^* se $N+1$ é ímpar.

Por fim, o último ponto fixo estudado nesta seção é aquele conhecido como ponto fixo de impureza fortemente acoplada, que consiste no caso em que $\tilde{\Gamma} \rightarrow \infty$ e um valor de \tilde{U}_d finito. Como todas as autoenergia de H_0 são proporcionais à $\tilde{\Gamma}^{-1/2}$ (vide apêndice), elas são muito grandes e podem ser ignoradas. Deste modo os operadores $c_{d\sigma}$ e $f_{0\sigma}$ são eliminados já que eles são conectados com os estados de H_0 . A hamiltoniana, desse caso, será chamada de $H_{N,SC}$ e pode ser escrita como:

$$H_{N,SC} = \Lambda^{(N-1)/2} \left[\sum_{n=1}^{N-1} \Lambda^{-n/2} \xi_n (f_{n\sigma}^\dagger f_{n+1\sigma} + f_{n+1\sigma}^\dagger f_{n\sigma}) \right] \quad (2.22)$$

Renomeando os operadores de $H_{N,SC}$, de modo que $f_1 \rightarrow f_0$, $f_2 \rightarrow f_1$, $f_3 \rightarrow f_2$, ... e $f_{N+1} \rightarrow f_N$. Essa hamiltoniana se tornará H_{N-1}^{BC} , com os coeficientes $\widehat{\xi}_n$ sendo na verdade ξ_{n+1} . Assim, $H_{N,SC}$ vai para H^* quando N é par, e para \widehat{H}^* quando N é ímpar, tomando $N \rightarrow \infty$. Chamando as duas hamiltonianas do ponto fixo deste caso de H_{SC}^* e \widehat{H}_{SC}^* , tem-se que $H_{SC}^* = H^*$ e $\widehat{H}_{SC}^* = \widehat{H}^*$.

2.3 Gráficos das propriedades termodinâmicas do modelo com uma banda e repulsão coulombiana no orbital f_0

Para ilustrar o que foi explicado na seção 2.2 sobre pontos fixos e realizar um estudo das propriedades termodinâmicas no contexto do Grupo de Renormalização Numérico, esta seção do trabalho é dedicada a fazer uma análise das propriedades termodinâmicas do problema de uma impureza magnética em uma banda metálica, cuja hamiltoniana tem a seguinte forma:

$$\begin{aligned} \frac{H}{D} = & \frac{(1 + \Lambda^{-1})}{2} \sum_{n=0}^{\infty} \Lambda^{-n/2} \xi_n \left(f_{n\sigma}^\dagger f_{(n+1)\sigma} + h.c \right) + \left(\frac{2\Gamma}{\pi D} \right)^{1/2} \left(f_{0\sigma}^\dagger c_{d\sigma} + h.c \right) \\ & + \frac{\epsilon_d}{D} c_{d\sigma}^\dagger c_{d\sigma} + \frac{U_d}{D} n_{d\uparrow} n_{d\downarrow} + \frac{\epsilon_0}{D} f_{0\sigma}^\dagger f_{0\sigma} + \frac{U_0}{D} n_{0\uparrow} n_{0\downarrow}. \end{aligned} \quad (2.23)$$

A ideia é analisar primeiramente o caso de uma única banda antes de passarmos ao caso de maior interesse, que é o de duas bandas acopladas. Na equação (2.23) foi adicionado o termo de espalhamento $\epsilon_0 f_0^\dagger f_0$, onde o valor ϵ_0 é a energia que um elétron tem ocupando o nível do operador f_0 . A justificativa para acrescentar esse termo é que como foi adicionado o termo U_0 , faz sentido fazer um estudo de como os termos U_0 e ϵ_0 afetam juntos a hamiltoniana.

De fato, há ainda uma razão mais profunda. No contexto de uma única banda, a presença do termo

$$\frac{U_0}{D} n_{0\uparrow} n_{0\downarrow}$$

foi discutida por Khrishna-murthy ^[9]. Partindo da observação de que

$$U_0 f_{0\uparrow}^\dagger f_{0\uparrow} f_{0\downarrow}^\dagger f_{0\downarrow} = \frac{U_0}{2} \left[(f_{0\uparrow}^\dagger f_{0\uparrow} + f_{0\downarrow}^\dagger f_{0\downarrow} - 1)^2 + (f_{0\uparrow}^\dagger f_{0\uparrow} + f_{0\downarrow}^\dagger f_{0\downarrow} - 1) \right], \quad (2.24)$$

mostra-se ^[9] que

$$(f_{0\uparrow}^\dagger f_{0\uparrow} + f_{0\downarrow}^\dagger f_{0\downarrow} - 1)$$

é um operador marginal, enquanto

$$(f_{0\uparrow}^\dagger f_{0\uparrow} + f_{0\downarrow}^\dagger f_{0\downarrow} - 1)^2$$

é um operador irrelevante. Assim, a menos de uma constante e de um operador irrelevante, o termo de repulsão coulombiana equivale a um termo de espalhamento com energia $U_0/2$.

Nesta seção e em todo o restante do trabalho vamos trabalhar com

$$2\epsilon_d + U_d = 0,$$

fixando os valores desse parâmetros e variando apenas as energias ϵ_0 e U_0 do orbital f_0 .

Vale ressaltar que, para gerar os gráficos, foi criado um programa em *Fortran* que recebe os dados do programa em *C++* que realiza o Grupo de Renormalização Numérico e a partir desses dados calcula os valores das propriedades termodinâmicas, fazendo a média no parâmetro z para diminuir oscilações que aparecem naturalmente nos gráficos gerados pelo método.

Por fim, é importante lembrar que todos os gráficos que serão apresentados a seguir são da contribuição do ponto quântico (impureza) às propriedades termodinâmicas e não do sistema completo.

2.3.1 Entropia

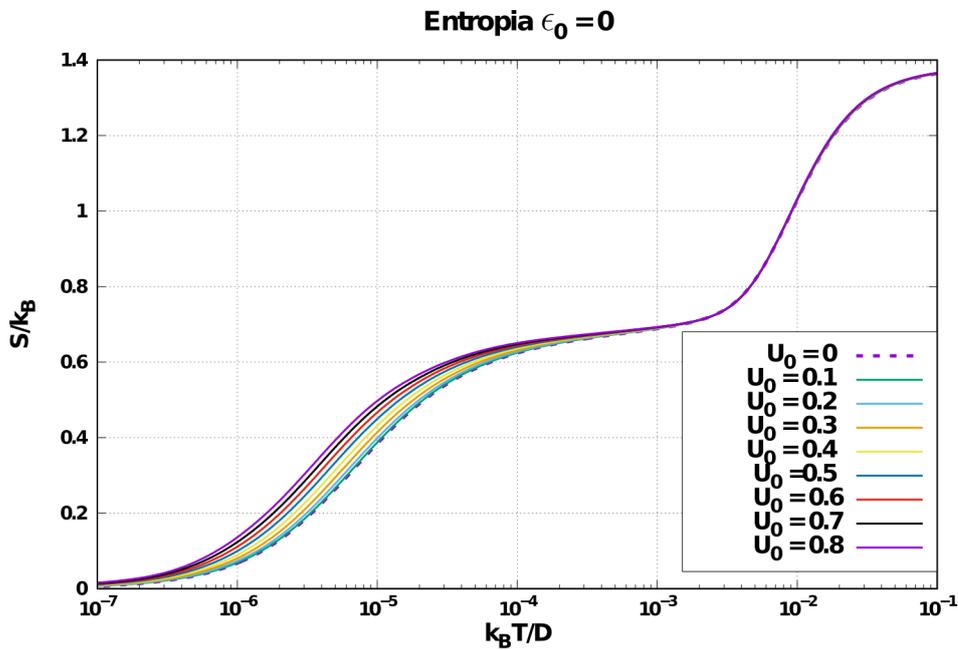


Figura 7 – Gráfico da entropia onde foi fixado o parâmetro ϵ_0 e variado o parâmetro U_0 para gerar diferentes curvas. Os parâmetros usados para gerar este gráfico, assim os outros gráficos deste trabalho, foram $\epsilon_d = -0.02$, $U_d = 0.04$, $V = 0.0293$ e $\Lambda = 10$, além disso foi utilizado como número N da etapa máxima $N = 29$ e dimensão de corte das matrizes como $DimMax = 200$.

Neste trabalho, a importância da análise do gráfico da entropia vem do fato de ser possível ver como ocorre a transição entre os diferentes pontos fixos da hamiltoniana à medida que a temperatura do sistema muda.

De forma simples é possível calcular a entropia da impureza (ponto quântico) em cada região de ponto fixo. Quando se está no ponto fixo da banda de condução livre, com altas temperaturas, a impureza é vista como quatro estados degenerados (vazio, \uparrow , \downarrow e $\uparrow\downarrow$), de modo que sua contribuição à entropia pode ser calculada como $\frac{S}{k_B} = \ln 4$.

Quando o sistema está no ponto fixo de Momento Localizado, não existe mais degenerescência entre os quatro estados da impureza, agora os estados \uparrow e \downarrow são degenerados

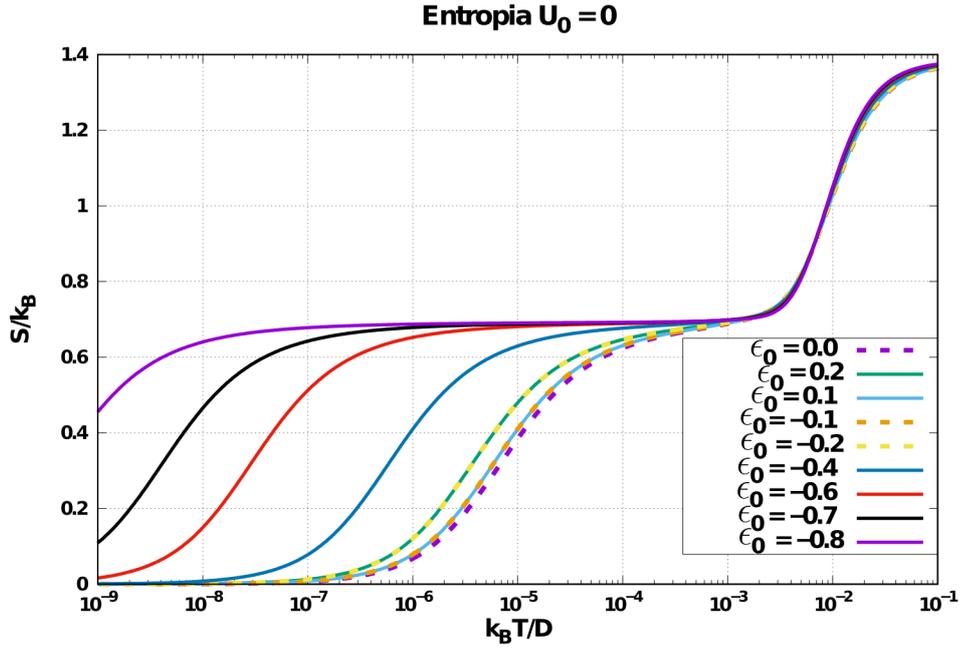


Figura 8 – Gráfico da entropia, onde foi fixado o parâmetro U_0 e variado o parâmetro ϵ_0 para gerar diferentes curvas. Os parâmetros usados foram os mesmos do gráfico da figura 7.

e tem menor energia que o estado vazio e o duplamente ocupado, de modo que a impureza tornou-se um momento localizado de spin- $\frac{1}{2}$, sendo possível calcular a entropia como $\frac{S}{k_B} = \ln 2$, já que apenas 2 estados agora são acessíveis.

Logo, o último ponto fixo é chamado de ponto fixo Fortemente Acoplado, é quando ocorre a formação de um singlete. Com a temperatura indo para zero, o nível de energia da impureza e um nível da banda de condução ficam fortemente acoplados de modo a formarem um estado não magnético, sendo a contribuição da impureza à entropia dada por $\frac{S}{k_B} = \ln 1 = 0$, considerando apenas o único estado de singlete da impureza.

Desse modo, é possível ver que nos gráficos das figuras 7 e 8, a entropia apresenta os valores de $\ln 4 \simeq 1.38$ para altas temperaturas, $\ln 2 \simeq 0.69$, quando a temperatura abaixa o suficiente para ocorrer a impureza de Momento localizado, e ocorrendo o efeito Kondo, chega-se ao ponto fixo Fortemente Acoplado, onde a entropia é $\ln 1 = 0$.

Os parâmetros da impureza foram escolhidos como $\epsilon_d = -0.02 \ll 1$, $U_d = -2\epsilon_d = 0.04$ e o parâmetro de hibridização foi escolhido como $V = 0.0293$. Esse valor foi escolhido de modo que $k_B T_K/D = 1.0 \times 10^{-5}$ para o modelo com $\epsilon_0 = U_0 = 0$. A determinação de T_K será discutida quando analisarmos a susceptibilidade magnética.

2.3.2 Calor específico

As transições dos pontos fixos é melhor visível no gráfico do calor específico, já que o calor específico pode ser definido como uma derivada parcial da entropia na temperatura $C = T \frac{\partial S}{\partial T} = \frac{\partial S}{\partial \ln T}$. Assim, os picos visíveis nos gráficos das figuras 9 e 10 do calor específico

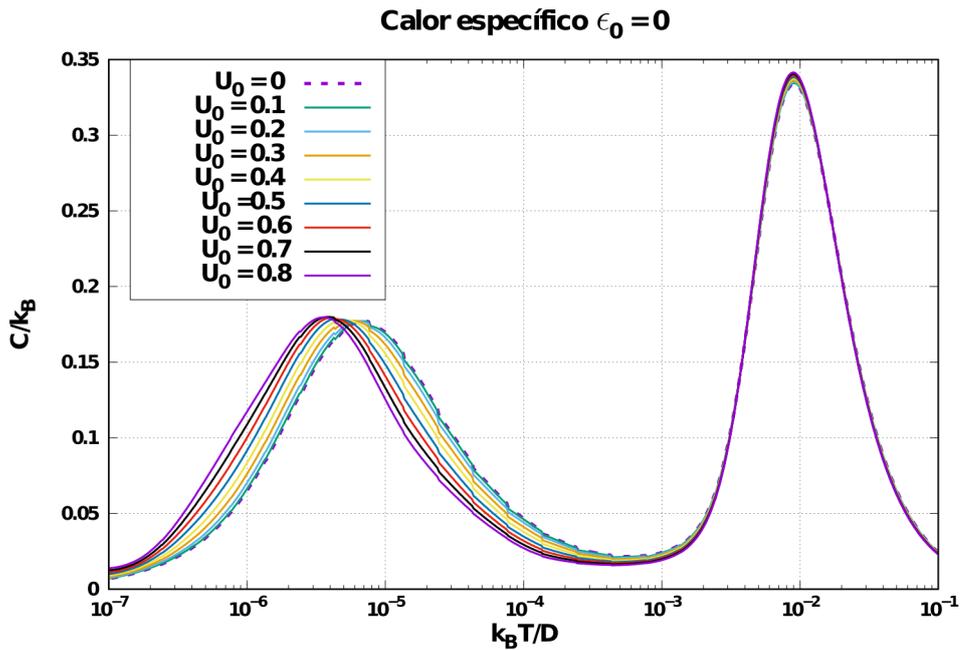


Figura 9 — Gráfico do calor específico, onde foi fixado o parâmetro ϵ_0 e variado o parâmetro U_0 para gerar diferentes curvas. Neste gráfico foram utilizados os mesmos parâmetros do gráfico da figura 7.

representam as transições de um ponto fixo para outro. O pico de temperatura mais baixa, chamado de ressonância de Kondo^[20], é a manifestação do efeito Kondo no calor específico, ocorrendo em temperaturas da ordem da temperatura de Kondo.

A temperatura Kondo (T_K) apareceu pela primeira vez quando J. Kondo trabalhava com o problema de impurezas magnéticas^[6]. Através de cálculos perturbativos, Kondo deduziu a existência de um mínimo na expressão da resistividade elétrica, justificando assim o resultado experimental. Apesar desse sucesso, a solução perturbativa de Kondo resultou no aparecimento de um termo logarítmico na equação da resistividade elétrica. Esse termo diverge a partir de um dado valor de temperatura e este valor ficou conhecido como Temperatura Kondo. A relevância de T_K no estudo das propriedades térmicas vem desse parâmetro ser característico de cada sistema físico e indica a faixa de temperatura em que o acoplamento entre a impureza e os estados de condução passa a ser significativo.

O segundo pico de temperatura mais alta no gráfico do calor específico é conhecido como anomalia de Schottky. Ele ocorre com energias na ordem de $U_d/2$, o pico da anomalia de Schottky nessa sua ocorrência é dada pela forma como a entropia variou passando do ponto fixo da banda de condução livre para o de momento localizado.

2.3.3 Susceptibilidade Magnética

A susceptibilidade magnética mede a capacidade que um material tem de magnetizar-se quando é submetido a um campo magnético. No caso deste trabalho, a importância

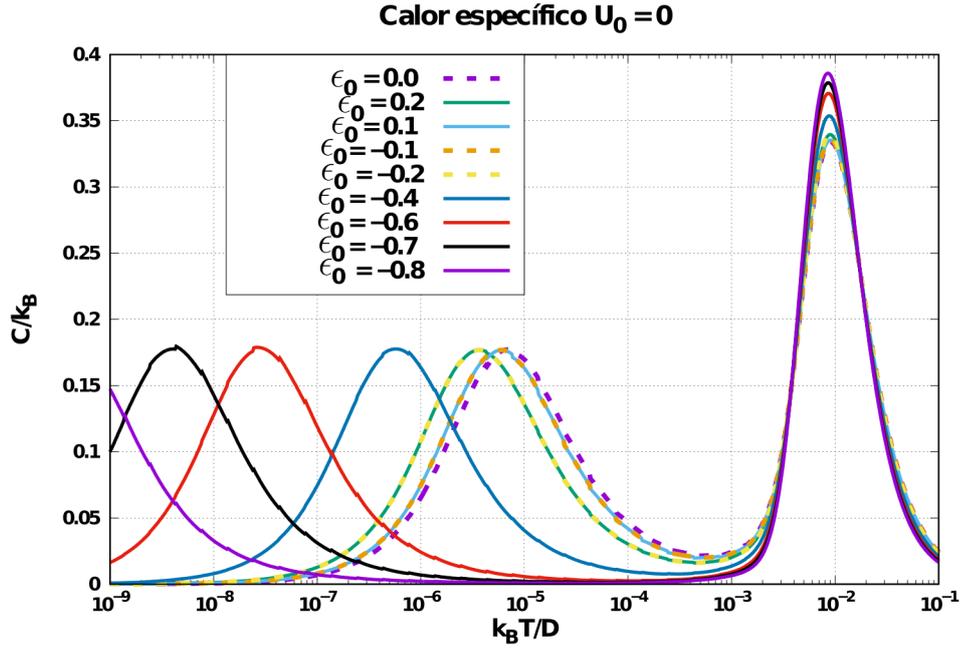


Figura 10 — Gráfico do calor específico onde foi fixado o parâmetro U_0 e variado o parâmetros ϵ_0 para gerar diferentes curvas. Nesse gráfico foram utilizados os mesmos parâmetros do gráfico da figura 7. Os picos das temperaturas mais baixas (chamado de ressonância de Kondo^[20]) ocorrem na ordem da temperatura Kondo, de modo que fica visível como a temperatura Kondo tem uma dependência com os parâmetros variados.

dessa propriedade vem do fato de ser possível analisar o efeito Kondo no ponto quântico através do gráfico da susceptibilidade magnética.

Além disso, através do gráfico da susceptibilidade magnética é possível encontrar o valor da temperatura Kondo^[9, 20]. Fazendo uma breve explicação de como é possível encontrar a temperatura Kondo (T_K) através do gráfico da susceptibilidade magnética, a partir do gráfico universal de $k_B T \chi / (g \mu_B)^2$ em função de $\ln(T/T_K)$ é possível ver que quando $T = T_K$ temos que $k_B T \chi / (g \mu_B)^2 = 0.701$ ^[20]. Assim, usa-se como a temperatura Kondo o valor da temperatura onde $k_B T \chi / (g \mu_B)^2 = 0.701$ seja satisfeito.

Desta forma, analisando os gráficos das figuras 11 e 12, é possível observar que para valores de temperaturas grandes, que correspondem a N (número da iteração da hamiltoniana) pequeno, o gráfico está no ponto fixo H_{FO}^* , que é apenas a hamiltoniana da banda de condução com o nível de energia da impureza somado, que tem valor de $\frac{k_B T \chi}{(g \mu_B)^2}$ de $\sim \frac{1}{8}$. À medida que a temperatura diminui, H_N^{BC} é substituída pela hamiltoniana de ponto fixo de momento localizado.

$H_{N,LM}^*$ geraria o valor característico para $\frac{k_B T \chi}{(g \mu_B)^2}$ de $\frac{1}{4}$ de uma impureza de spin- $\frac{1}{2}$, mas logo H_N é dominada pelo ponto fixo da hamiltoniana de impureza fortemente acoplada, fazendo $\frac{k_B T \chi}{(g \mu_B)^2}$ ir para zero rapidamente com a temperatura diminuindo. Uma análise mais aprofundada do comportamento da susceptibilidade magnética pode ser encontrado na referência ^[9].

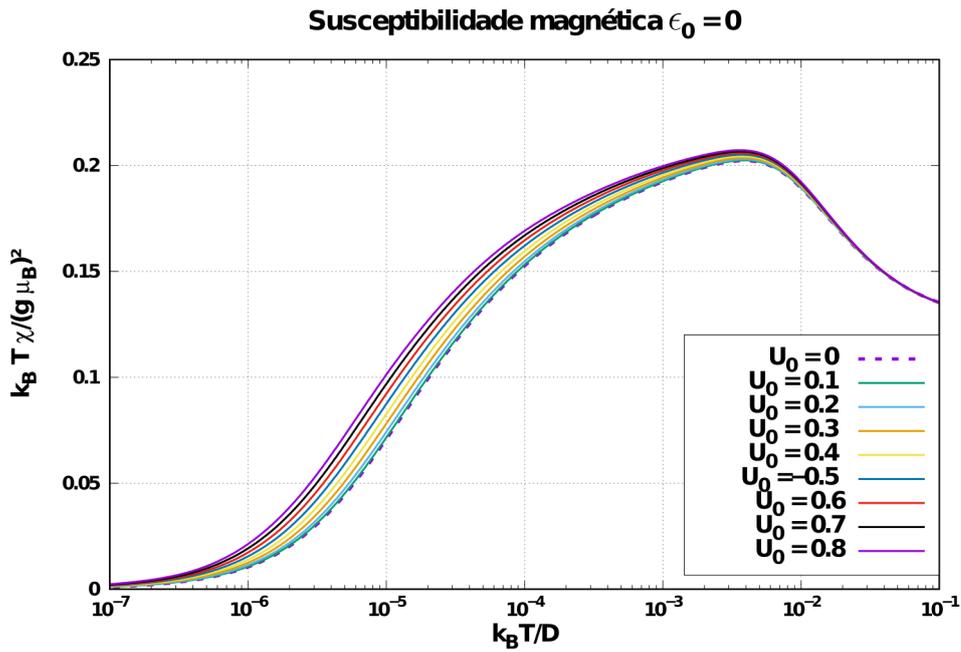


Figura 11 – Gráfico da susceptibilidade magnética onde foi fixado o parâmetro ϵ_0 e variado o parâmetro U_0 para gerar diferentes curvas. Nesse gráfico foram utilizados os mesmos parâmetros do gráfico da figura 7.

2.3.4 Comportamento da Temperatura Kondo para o caso de 1 banda

Um dos objetivos deste trabalho é analisar o efeito que o parâmetro U_0 , repulsão coulombiana no orbital f_0 , causa ao ser adicionado no Hamiltoniano de Anderson. Como pôde ser visto nos gráficos da seção anterior, a forma geral dos gráficos não é alterada, em outras palavras, os pontos fixos da hamiltoniana continuam presentes e podem ser vistos nos gráficos, porém, a presença do parâmetro U_0 gerou alterações na temperatura Kondo dos gráficos.

Analisando os gráficos das figuras 13 e 14, a dependência da temperatura Kondo com o parâmetro U_0 não é linear, claramente existe um máximo na temperatura Kondo para uma combinação de valores dos parâmetros U_0 e ϵ_0 . O máximo obedece à seguinte equação:

$$\epsilon_0 + \frac{U_0}{2} = 0. \quad (2.25)$$

Para compreender esse comportamento da temperatura Kondo, vamos retomar a discussão feita no início da seção 2.3 sobre a equação (2.24), que reproduzimos aqui:

$$U_0 f_{0\uparrow}^\dagger f_{0\uparrow} f_{0\downarrow}^\dagger f_{0\downarrow} = \frac{U_0}{2} \left[(f_{0\uparrow}^\dagger f_{0\uparrow} + f_{0\downarrow}^\dagger f_{0\downarrow} - 1)^2 + (f_{0\uparrow}^\dagger f_{0\uparrow} + f_{0\downarrow}^\dagger f_{0\downarrow} - 1) \right]. \quad (2.26)$$

A importância da equação (2.26) vem do conceito de operadores relevantes, irrelevantes e marginais^[9]. Nesse contexto, operadores irrelevantes tem contribuições cada vez

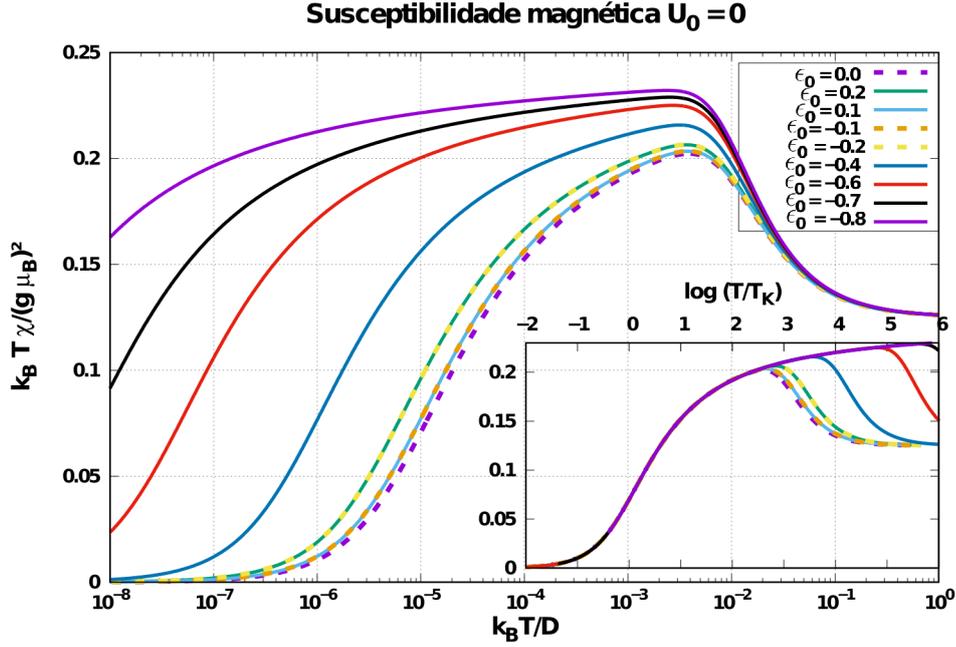


Figura 12 — Gráfico da susceptibilidade magnética onde foi fixado o parâmetro U_0 e variado o parâmetro ϵ_0 para gerar diferentes curvas. Nesse gráfico foram utilizados os mesmos parâmetros do gráfico da figura 7. Além disso, foi incluído o gráfico da susceptibilidade em função da temperatura dividida pela temperatura Kondo (T/T_K), onde é possível construir uma curva universal. Assim, é possível ver que os parâmetros não mudam a forma da curva, apenas deslocam a temperatura Kondo.

menores quando o número de iterações N aumenta, de modo que a sua contribuição para os autovalores se tornam irrelevantes, o mesmo não acontece com os operadores relevantes, que crescem no decorrer das iterações. Então, os operadores marginais, tem comportamento indefinido a princípio, podendo se tornar importantes ou não. Por exemplo, no caso do Hamiltoniano Kondo, o termo $J f_{0,\mu}^\dagger \vec{\sigma}_{\mu,\nu} f_{0,\nu} \cdot \vec{S}$ é um operador marginal responsável pelo efeito Kondo.

É possível compreender com mais detalhes o conceito de operadores relevantes e marginais seguindo o que foi feito na referência do artigo do Krishna-murthy^[9], sendo H^* um ponto fixo da transformação do Grupo de Renormalização Numérico, temos:

$$\mathcal{T}^2[H^*] = H^*. \quad (2.27)$$

Assim, pela definição de ponto fixo, usando uma hamiltoniana próxima do ponto fixo H^* , sendo δH_N o desvio de H_N do ponto fixo, obtendo:

$$\delta H_{N+2} = H_{N+2} - H^* = \mathcal{T}^2[H^* + \delta H_N] - H^*. \quad (2.28)$$

Tomando δH_N pequeno o suficiente, é possível utilizar no lugar da transformação

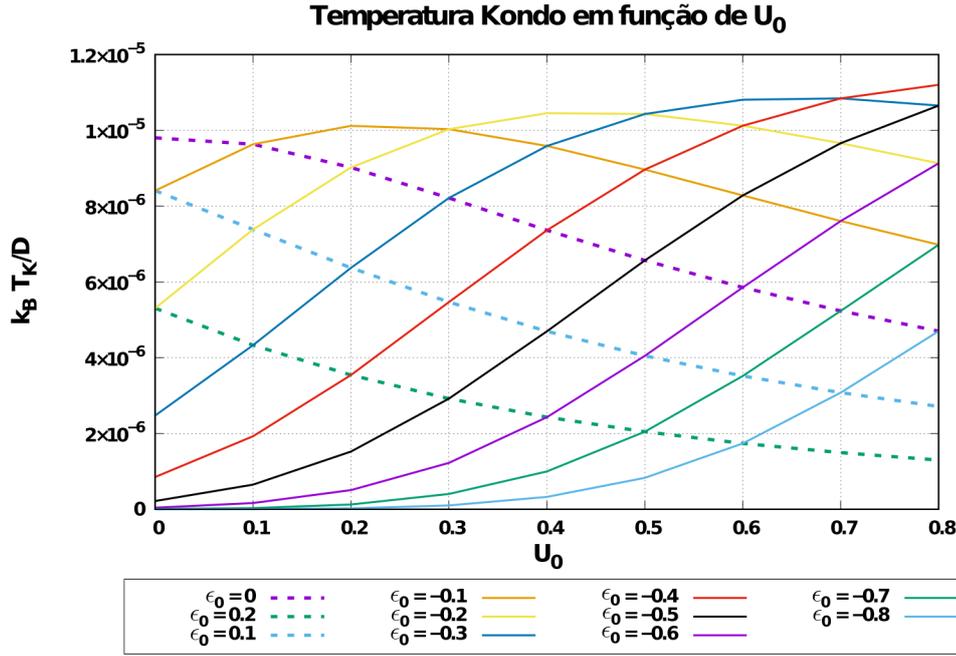


Figura 13 – Gráfico da temperatura Kondo em função do parâmetro U_0 , utilizando diferentes valores de ϵ_0 em cada curva. Nesse gráfico foram utilizados os mesmos parâmetros do gráfico da figura 7. O gráfico é análogo ao gráfico da figura 13.

\mathcal{T} , uma transformação linear \mathcal{L} :

$$\delta H_{N+2} = \mathcal{L}_{(H^*)} \delta H_N = \mathcal{L}^* \delta H_N. \quad (2.29)$$

Sendo \mathcal{L}^* uma transformação linear, logo existe autovalores e auto-operadores (λ^* e O^*), que satisfaz:

$$\mathcal{L}^* \lambda_l^* = \mathcal{L}^* O_l^*, \quad (2.30)$$

Lembrando que λ^* e O^* vão depender do ponto fixo H^* , que está próximo de H_N . Sendo assim, é possível construir uma combinação linear do tipo:

$$\delta H_N = \sum_l C_l \lambda_l^{*N/2} O_l^*, \quad (2.31)$$

onde C_l é uma constante arbitrária. Analisando a equação (2.31), temos que operadores O_l^* que tem $\lambda_l^* < 1$ são chamados irrelevantes, operadores O_l^* com $\lambda_l^* > 1$ são chamados relevantes e operadores O_l^* que tem $\lambda_l^* = 1$ são conhecidos como marginais^[9].

Terminado a explicação sobre operadores relevantes, irrelevantes e marginais, é possível retomar a análise da equação (2.26). Nela é possível ver que existe duas contribuições, uma feita pelo termo $(f_{0\uparrow}^\dagger f_{0\uparrow} + f_{0\downarrow}^\dagger f_{0\downarrow} - 1)^2$, que é irrelevantes, e outra pelo termo $(f_{0\uparrow}^\dagger f_{0\uparrow} + f_{0\downarrow}^\dagger f_{0\downarrow} - 1)$ que é marginal. Desse modo, se descartarmos o termo irrelevante,

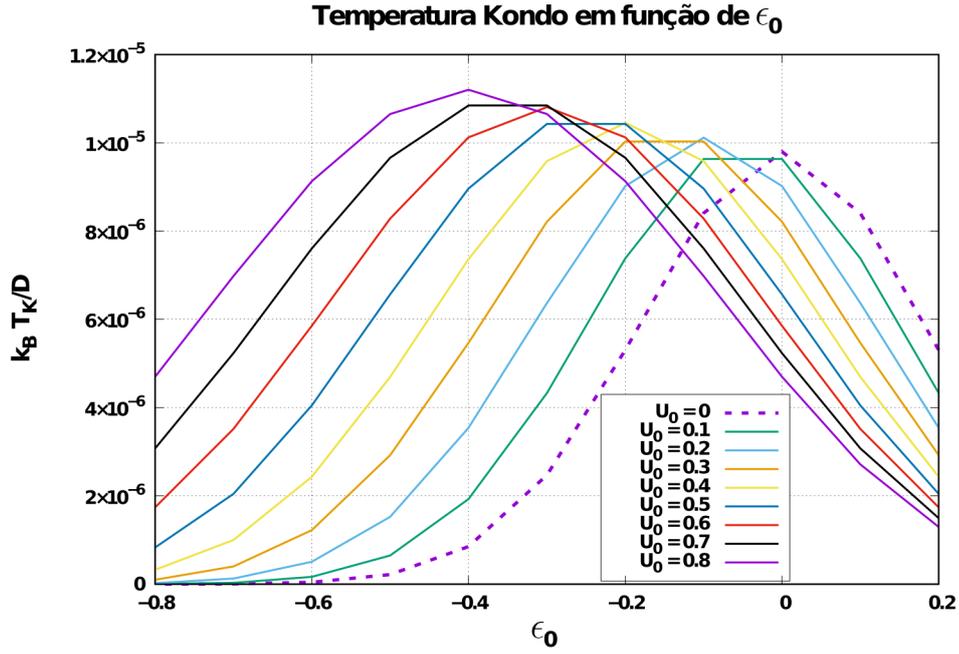


Figura 14 — Gráfico da temperatura Kondo em função do parâmetro ϵ_0 , utilizando diferentes valores de U_0 em cada curva. Nesse gráfico foram utilizados os mesmos parâmetros do gráfico da figura 7. Aqui é visível que existe uma combinação dos parâmetros U_0 e ϵ_0 onde é obtida uma temperatura Kondo máxima.

incorporamos o efeito do termo de repulsão coulombiana no termo de espalhamento, trocando ϵ_0 por

$$\epsilon'_0 = \epsilon_0 + \frac{U_0}{2}, \quad (2.32)$$

de modo que, ao acrescentar o termo U_0 é na prática apenas uma mudança no termo da energia do estado f_0 .

É possível ir além, e incorporar o efeito do espalhamento no termo de hibridização e na energia do nível da impureza^[13], redefinindo V e ϵ_d em função do nível de energia ϵ_0 , obtendo assim as seguintes equações:

$$V' = \frac{V}{\sqrt{1 + \left(\frac{\pi\epsilon'_0}{2D}\right)^2}}, \quad (2.33)$$

$$\epsilon'_d = \epsilon_d - \frac{\frac{\pi^2 V^2 \epsilon'_0}{4D^2}}{1 + \left(\frac{\pi\epsilon'_0}{2D}\right)^2}. \quad (2.34)$$

Assim o efeito do termo U_0 na hamiltoniana apenas modificando o termo de hibridização e a energia da impureza, fazendo $V \rightarrow V'$ e $\epsilon_d \rightarrow \epsilon'_d$.

Com os resultados acima, é possível utilizar os parâmetros modificados (V' e ϵ'_d) para estimar o valor da temperatura Kondo de forma analítica (T_K). O Hamiltoniano de Anderson, no ponto fixo de momento localizado, pode ser efetivamente descrito pelo

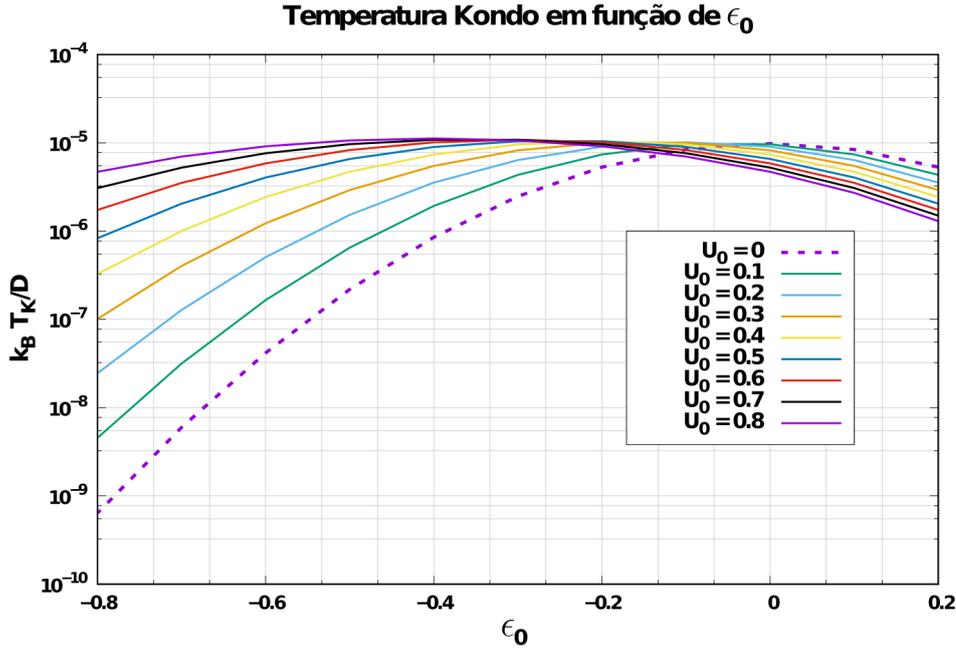


Figura 15 – Gráfico da temperatura Kondo em função do parâmetro U_0 . São os mesmos dados do gráfico da figura 14, apenas mudando a escala do eixo y para logarítmica para facilitar a comparação como gráficos equivalentes obtidos para o modelo de duas bandas.

Hamiltoniano Kondo, com constante J dada pela transformação de Schrieffer-Wolf^[8],

$$\rho J = -\frac{2\Gamma'}{\pi} \left(\frac{1}{-\epsilon'_d} + \frac{1}{\epsilon'_d + U_d} \right), \quad (2.35)$$

onde ρ é a densidade de estados por spin na banda de condução.

Para ρJ pequeno o suficiente, é possível usar como aproximação da temperatura Kondo^[9] a seguinte formula:

$$k_B T_K \simeq D \sqrt{|\rho J|} e^{-\frac{1}{|\rho J|}}. \quad (2.36)$$

Dessa maneira, a temperatura Kondo é uma função crescente de $|\rho J|$. Por sua vez, a equação (2.35) nos diz que para aumentar $|\rho J|$ devemos aumentar Γ' (que equivale a aumentar V') e também que tanto maior será $|\rho J|$ quanto mais próximos estivermos da condição de simetria partícula-buraco,

$$2\epsilon'_d + U_d = 0,$$

pois é nesta situação que maximizamos o termo entre parêntesis em (2.35). Voltando em (2.33) e (2.34), vemos que conseguiremos maximizar $|\rho J|$, e consequentemente T_K , se tivermos

$$\epsilon'_0 = 0.$$

O que implica que $\epsilon_0 + \frac{U_0}{2} = 0$, em concordância com os resultados numéricos mostrados nas figuras 13, 14 e 15.

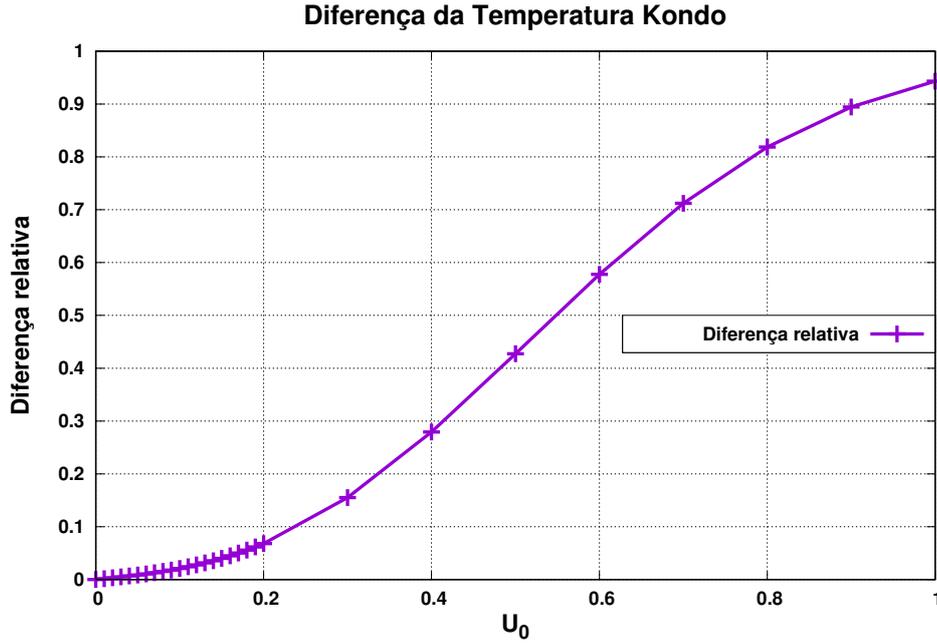


Figura 16 — Gráfico da diferença relativa das temperaturas Kondo ($T_{K,U_0} - T_{K,\epsilon'_0}/T_{K,U_0}$) onde T_{K,U_0} é a temperatura Kondo do modelo com $U_0 > 0$ e $\epsilon_0 = 0$ e T_{K,ϵ'_0} é a temperatura Kondo do modelo sem repulsão coulombiana e energia de espalhamento igual a $\epsilon'_0 = U_0/2$, de acordo com a equação (2.32). O objetivo deste gráfico é determinar para quais intervalos de U_0 a aproximação da equação (2.32) ainda é viável e como o erro relativo da temperatura Kondo cresce aumentando o valor de U_0 . Para construir a curva foram utilizados os pontos que estão marcados na curva, onde pode ser observado que no intervalo entre 0 e 0.2 foi utilizado uma densidade maior de pontos para determinar com maior precisão o comportamento da curva.

Para avaliar os valores de U_0 para os quais a aproximação da equação (2.32) é válida, foi construído o gráfico da figura 16.

Analisando o gráfico da diferença entre os valores do programa utilizando a aproximação da equação (2.32) e sem utilizá-la, é possível ver que para valores pequenos de U_0 , a aproximação que foi feita desconsiderando o termo irrelevante da equação (2.26) é válida. Sendo que a partir de valores acima de $U_0 = 0.2$ a diferença relativa começa crescer rapidamente. Para $U_0 \leq 0.2$, a diferença relativa entre as temperaturas é menor do que 10%. Como a nossa escala de energia é a semi-largura da banda de condução, que é tipicamente grande (ordem de 1 eV), esperamos que valores realistas de U_0/D sejam bem menores do que 1, caindo na região onde o efeito do operador irrelevante em (2.26) é pequeno na definição da temperatura Kondo.

2.4 Gráficos das propriedades termodinâmicas do modelo com duas bandas e repulsão coulombiana nos orbitais $f_{0,L}$ e $f_{0,R}$

Feita a análise dos dados gerados pelo programa que resolve o problema com uma banda, esta seção será dedicada à análise do problema principal deste trabalho. Para resolver a hamiltoniana do sistema composto por um ponto quântico entre duas bandas foi utilizado um programa criado em *C++*. Além disso, a etapa 0 da hamiltoniana que serve como condição inicial do programa em *C++* é feita por um programa separado escrito em *Fortran* utilizando a biblioteca de sub-rotinas *LAPACK*^[26].

Assim como foi no caso do problema de uma banda, também será adicionado o parâmetro ϵ_0 na hamiltoniana do problema de duas bandas, de modo que ela fica:

$$\begin{aligned} \frac{H}{D} = & \frac{(1 + \Lambda^{-1})}{2} \sum_{n=0}^{\infty} \Lambda^{-n/2} \xi_n \left(f_{Pn\sigma}^\dagger f_{P(n+1)\sigma} + f_{In\sigma}^\dagger f_{I(n+1)\sigma} + h.c \right) \\ & + \left(\frac{2\Gamma}{\pi D} \right)^{1/2} \left(f_{P0\sigma}^\dagger c_{d\sigma} + h.c \right) + \frac{\epsilon_d}{D} c_{d\sigma}^\dagger c_{d\sigma} + \frac{U_d}{D} n_{d\uparrow} n_{d\downarrow} \\ & + \frac{\epsilon_0}{D} f_{P0\sigma}^\dagger f_{P0\sigma} + \frac{\epsilon_0}{D} f_{I0\sigma}^\dagger f_{I0\sigma} + \frac{U_0}{D} (n_{L0\uparrow} n_{L0\downarrow} + n_{R0\uparrow} n_{R0\downarrow}). \end{aligned} \quad (2.37)$$

Como pode ser visto na equação acima, a principal diferença entre as hamiltonianas das equações (2.37) e (2.23) é o acréscimo de uma banda de condução e a presença de um termo de repulsão coulombiana de cada lado do ponto quântico. No caso da modelagem do problema de duas bandas sem o termo U_0 , é possível fazer a transformação para utilizar os operadores pares e ímpares no lugar dos operadores direita e esquerda, de modo que o ponto quântico fica apenas acoplado com a banda dos operadores pares, podendo ser possível resolver o problema agora como uma banda de elétrons acoplados com o ponto quântico mais uma banda livre desacoplada do ponto quântico, o que torna o problema de duas bandas equivalente ao problema de uma banda, que é a forma que esse problema é resolvido nos trabalhos das referências^[13, 19, 12].

Porém, ao adicionar o termo U_0 na hamiltoniana para modelar o problema de duas bandas, ocorre que não é mais possível desacoplar a banda de elétrons dos operadores ímpares do ponto quântico como feito anteriormente. O motivo para isso é que os operadores ímpares ficam acoplados indiretamente ao ponto quântico através da banda par, já que U_0 vai ter componentes de ambas as bandas, como pode ser visto pela equação (1.34) da seção 1.3 deste trabalho.

Dessa forma, o problema agora não é apenas o problema de uma banda de elétrons acoplados com o ponto quântico mais uma banda livre desacoplada do ponto quântico, na etapa 0 existe o termo U_0 que relaciona as duas bandas. Por essa razão, as matrizes da etapa 0 foram feitas manualmente utilizando o método iterativo mencionado na seção

1.4, as matrizes criadas manualmente foram diagonalizadas em um programa escrito em *Fortran* e seus autovetores e autovalores entram como ponto de partida para o programa em *C++* que aplica o Grupo de Renormalização Numérico. O intuito é utilizar o fato de que apenas foi adicionado a repulsão coulombiana (U_0) nos operadores da etapa 0 (f_{L0} e f_{R0}), sendo que a partir da etapa 1 em diante, os cálculos numéricos podem ser realizados por um programa que não lida diretamente com o parâmetro U_0 .

Por fim, da mesma forma que foi feito no caso de uma banda, os gráficos das propriedades termodinâmicas são obtidos fazendo uma média no parâmetro z para diminuir as oscilações dos gráficos.

2.4.1 Entropia

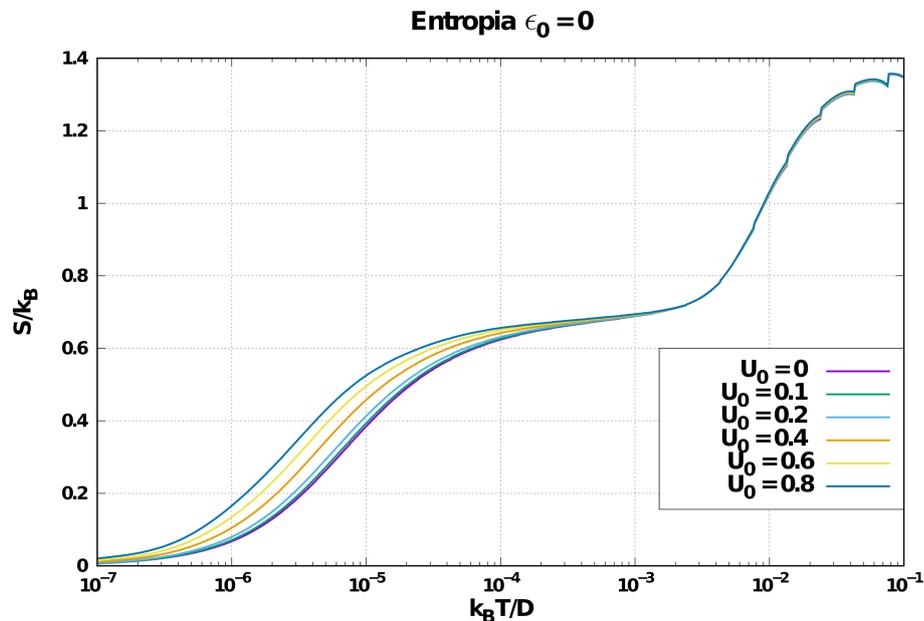


Figura 17 – Gráfico da entropia do problema de 2 bandas, onde foi fixado o parâmetro ϵ_0 e variado o U_0 para gerar diferentes curvas. Foram utilizados os seguintes parâmetros para criar as curvas do caso de 2 bandas, $\epsilon_d = -0.02$, $U_d = 0.04$, $V = 0.0293$ e $\Lambda = 10$, além disso foi utilizado como número N da etapa máxima $N = 19$ e dimensão de corte das matrizes como $DimMax = 200$.

Os primeiros gráficos que serão analisados são da entropia. Observando o gráfico da figura 17 é possível ver a forma da curva da entropia não mudou comparado com os gráficos do problema de uma banda estudados na seção 2.3, o que mostra que os dois problemas tem os mesmos pontos fixos já discutidos anteriormente.

No caso da entropia, os valores que esses pontos fixos vão gerar são $\ln 4 \simeq 1.38$ para altas temperaturas, $\ln 2 \simeq 0.69$, quando a temperatura abaixa o suficiente para ocorrer o Momento localizado, e ocorrendo o efeito Kondo se chega ao ponto fixo Fortemente Acoplado, onde a entropia é $\ln 1 = 0$.

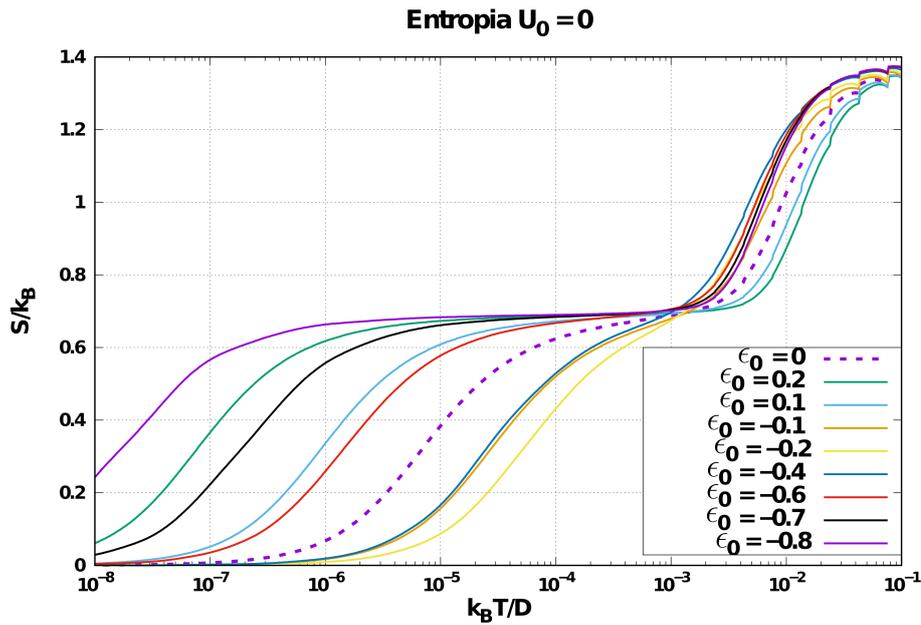


Figura 18 — Gráfico da entropia do problema de 2 bandas, onde foi fixado o parâmetro U_0 e variado o ϵ_0 para gerar diferentes curvas. Os parâmetros usados foram os mesmos do gráfico da figura 17.

Também é possível notar vendo os gráficos das figuras 17 e 18 que os começos das curvas, na região de altas temperaturas, os gráficos apresentam oscilações. A explicação para isso vem do fato que o programa que realiza o método do Grupo de Renormalização Numérico usado neste trabalho limita o tamanho máximo das matrizes dos subespaços (Q,S) , que serão diagonalizados, esse corte é feito nas energias mais altas das matrizes e é sentido principalmente nas primeiras etapas de temperatura altas, onde esses estados cortados tem mais relevância.

A necessidade de fazer um corte na quantidade de autoenergia e autovetores, que serão usados no programa, vem do fato que as dimensões das matrizes crescem de forma exponencial e muito mais rápido do que no problema de duas bandas, já que existe uma banda inteira a mais de estados disponíveis. Há também a possibilidade de ser calculado o quadrado de combinações de estados, como pode ser visto na seção 1.4. Além disso, foi usado um computador pessoal para realizar os cálculos numéricos de modo que o tempo que o programa leva para ser executado é um fator a ser levado em conta, já que o programa é executado diversas vezes com diferentes parâmetros.

2.4.2 Susceptibilidade Magnética

Feita a análise da entropia, nesta sub-seção será feita a análise dos gráficos da susceptibilidade magnética do problema do ponto quântico entre duas bandas.

Da mesma forma que foi visto na entropia, a forma das curvas se manteve quando comparado com o problema de uma banda, visto que os dois problemas apresentam os

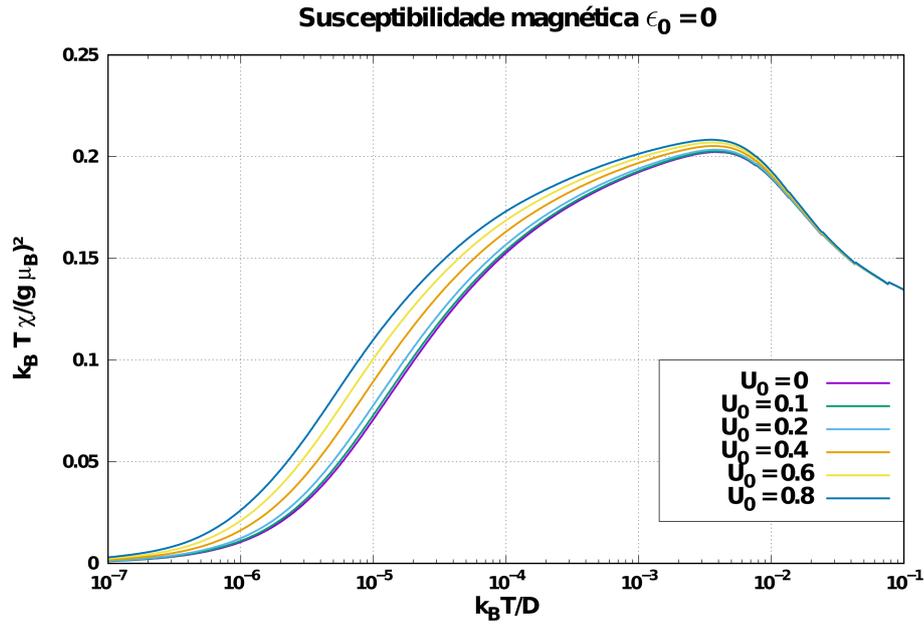


Figura 19 — Gráfico da susceptibilidade magnética do problema de 2 bandas, onde foi fixado o parâmetro ϵ_0 e variado o U_0 para gerar diferentes curvas. Os parâmetros usados foram os mesmos do gráfico da figura 17.

mesmos pontos fixos. No caso da susceptibilidade magnética ela toma o valor característico para $\frac{k_B T \chi}{(g \mu_B)^2}$ de $\frac{1}{4}$ de uma impureza de spin- $\frac{1}{2}$, mas logo H_N é dominada pelo ponto fixo da hamiltoniana de impureza fortemente acoplada, fazendo $\frac{k_B T \chi}{(g \mu_B)^2}$ ir para zero rapidamente com a temperatura diminuindo.

Além disso, analisando o gráfico da figura 20 da susceptibilidade magnética em função de T/T_K , é possível ver que acrescentar o termo U_0 no problema das duas bandas não alterou a propriedade universal da curva. De modo que alterações no U_0 tiveram efeito relevante apenas na temperatura Kondo e não na forma da curva. A forma como o parâmetro U_0 afeta a temperatura Kondo é mais complexo do que aparenta a primeira vista analisando apenas os gráficos das propriedades termodinâmicas.

2.4.3 Temperatura Kondo para o caso de 2 bandas

Analisando as Temperaturas Kondo dos gráficos das propriedades termodinâmicas que encontramos as principais diferenças entre o problema de uma banda para o problema com duas bandas.

Observando os gráficos das figuras 21 e 22 é possível ver que ao contrário do problema anterior, os máximos não ocorrem mais respeitando a equação (2.25). A adição do parâmetro U_0 no problema de duas bandas comprometeu as equações (2.32), (2.33) e (2.34), pelo fato das duas bandas serem acopladas ao ponto quântico.

O papel do U_0 como ponte entre as bandas pares e ímpares e ligando indiretamente

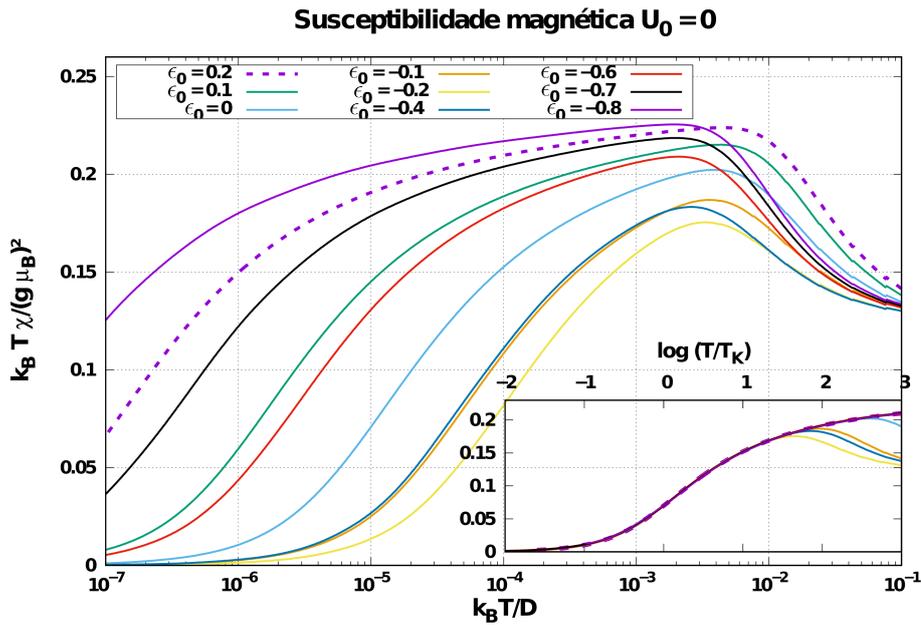


Figura 20 — Gráfico da susceptibilidade magnética do problema de 2 bandas, onde foi fixado o parâmetro U_0 e variado o ϵ_0 para gerar diferentes curvas. Nesse gráfico foram utilizados os mesmos parâmetros do gráfico da figura 17. Além disso, foi incluído o gráfico da susceptibilidade em função da temperatura dividida pela temperatura Kondo (T/T_K), onde é possível construir uma curva universal, da mesma forma que foi feito no caso de 1 banda. Assim, é possível ver que os parâmetros não mudam a forma da curva, apenas deslocam a temperatura Kondo. Os parâmetros usados foram os mesmos do gráfico da figura 7.

o ponto quântico a banda ímpar afeta a temperatura Kondo do sistema de modo que não é mais possível fazer uma comparação direta entre o problema de uma banda e o de duas bandas. Toda a discussão que foi feita na sub-seção 2.3.4 não é válida para o caso de duas bandas. O problema de duas bandas mostrou um comportamento mais complexo, como pode ser visto no gráfico da figura 22, para valores muito negativos de ϵ_0 os valores da temperatura Kondo de diferentes curvas de U_0 teve uma variação de ordens de grandeza. Por exemplo, os dados do gráfico da figura 22, tomando $\epsilon_0 = -0,8$ a curva com $U_0 = 0$ tem $\frac{K_B T_K}{D} \approx 10^{-7}$, enquanto que a curva com $U_0 = 0,8$ tem $\frac{K_B T_K}{D} \approx 10^{-2}$.

Este trabalho limitou-se a fazer uma análise numérica do problema da temperatura Kondo do caso de duas bandas, de modo que entender de forma analítica como é o comportamento da curva da temperatura Kondo com a adição do parâmetro U_0 fica como um problema em aberto.

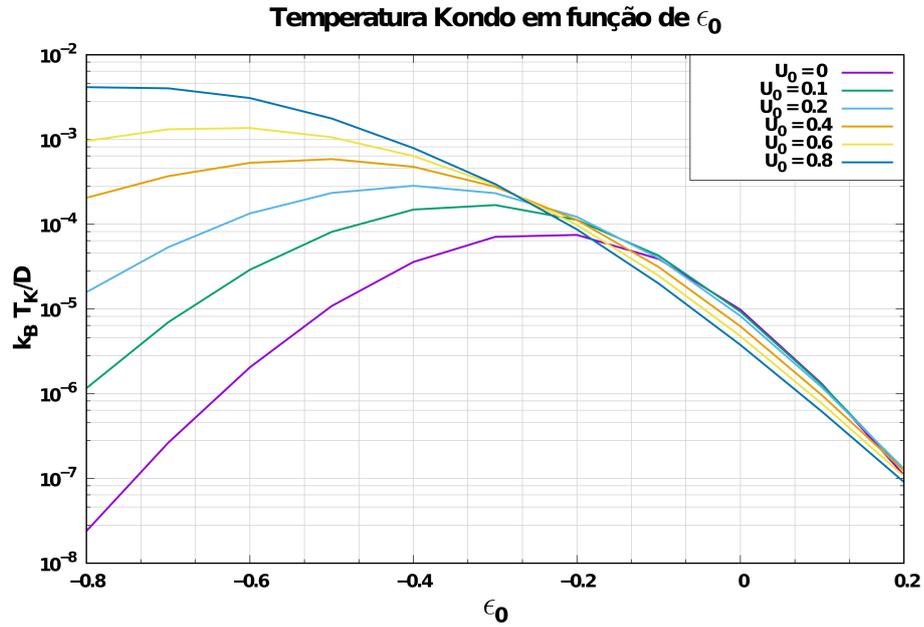


Figura 21 – Gráfico da temperatura Kondo do problema de 2 bandas em função do parâmetro ϵ_0 , utilizando diferentes valores de U_0 em cada curva. Nesse gráfico foram utilizados os mesmos parâmetros do gráfico da figura 17.

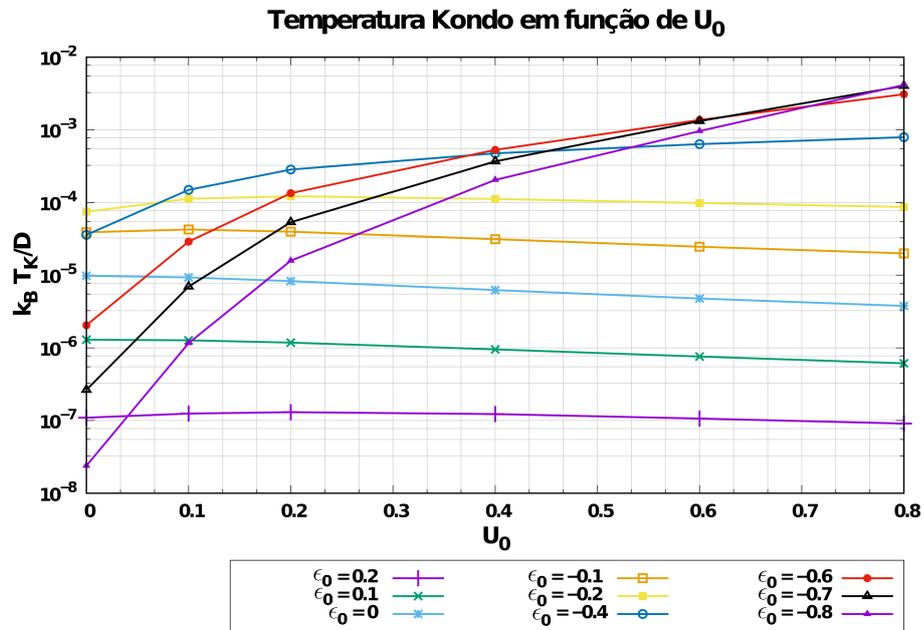


Figura 22 – Gráfico da temperatura Kondo do problema de 2 bandas em função do parâmetro U_0 , utilizando diferentes valores de ϵ_0 em cada curva. Nesse gráfico foram utilizados os mesmos parâmetros do gráfico da figura 17. As marcações nas curvas indicam os pontos que foram usados para criar as curvas.

3 Construção do método de cálculo da condutância

A condutividade elétrica é a grandeza física, que indica a facilidade com a qual um material é capaz de conduzir corrente elétrica. Assim, a importância para o cálculo da condutância está no fato dela ser uma propriedade de transporte do ponto quântico que pode sofrer grande impacto com a ocorrência do efeito Kondo em baixas temperaturas. Parte dos cálculos dessa seção foram tirados e adaptados das referências [13, 12].

O primeiro passo para o cálculo da corrente, da mesma forma que foi feito com as outras propriedades, é determinar a hamiltoniana, assim, utilizando a equação (1.5) e usando que $V_R = V_L$ e $U_{L0} = U_{R0}$.

$$H_0 = \sum_{i=L,R} \left[\sum_k \epsilon_k c_{ik\sigma}^\dagger c_{ik\sigma} + \sum_k V (c_{ik\sigma}^\dagger c_{d\sigma} + c_{d\sigma}^\dagger c_{ik\sigma}) \right] + \epsilon_d c_{d\sigma}^\dagger c_{d\sigma} + U_d n_{d\uparrow} n_{d\downarrow} + U_0 n_{L0\uparrow} n_{L0\downarrow} + U_0 n_{R0\uparrow} n_{R0\downarrow}. \quad (3.1)$$

Para que ocorra transporte de elétrons pelo ponto quântico, será definido uma diferença de potencial elétrico entre as duas bandas, sendo N_L o número de elétrons na banda da esquerda e N_R o número de elétrons da banda da direita. O potencial elétrico vai gerar uma perturbação da forma:

$$\Delta H = \frac{e\Delta V}{2} (N_L - N_R) e^{i\omega t + \eta t}. \quad (3.2)$$

Onde será definido ΔH_0 como :

$$\Delta H_0 = \frac{e\Delta V}{2} (N_L - N_R). \quad (3.3)$$

Será considerando $H = H_0 + \Delta H$, dados pelas equações (3.1) e (3.2), e considerando $H_0 |n\rangle = E_n |n\rangle$, de modo que $|n\rangle$ e E_n sejam autoestados e autoenergia de H_0 .

O próximo passo será construir o operador da corrente que passa pelo ponto quântico. Para isso, será considerado que para um elétron sair de uma banda e ir para a outra ele deve, obrigatoriamente, passar pelo ponto quântico. Assim, o operador corrente será definido como:

$$\hat{I} = \frac{e(\dot{N}_L - \dot{N}_R)}{2}. \quad (3.4)$$

A equação (3.4) vem da própria definição da corrente como a derivada temporal do número de carga, onde e é a carga do elétron, foram usadas as derivadas temporais dos operadores número de elétrons de ambas as bandas (\dot{N}_L e \dot{N}_R) e o valor total é dividido por 2, já que o mesmo elétron é contabilizado pelas duas bandas para o cálculo da corrente. Para calcular as derivadas temporais dos números de carga das bandas na equação (3.4) serão usados seus comutadores:

$$\dot{N}_L = \frac{i}{\hbar}[H_0, N_L], \quad (3.5)$$

$$\dot{N}_R = \frac{i}{\hbar}[H_0, N_R]. \quad (3.6)$$

Usando as definições dos operadores número de ambas as bandas (\dot{N}_L e \dot{N}_R) através os operadores de criação e aniquilação da equação 3.1, temos:

$$N_R = \sum_k c_{kR}^\dagger c_{kR}, \quad (3.7)$$

$$N_L = \sum_k c_{kL}^\dagger c_{kL}. \quad (3.8)$$

Onde o índice σ , que indica a soma no spin, fica implícito nos operadores para não sobrecarregar a notação. Por fim, é possível calcular \dot{N}_L e \dot{N}_R substituindo as equações (3.7) e (3.8) nas equações (3.5) e (3.6), obtendo:

$$\dot{N}_L = \frac{V}{i\hbar} \sum_k (c_{kL}^\dagger c_d - c_d^\dagger c_{kL}), \quad (3.9)$$

$$\dot{N}_R = \frac{V}{i\hbar} \sum_k (c_{kR}^\dagger c_d - c_d^\dagger c_{kR}). \quad (3.10)$$

Com os resultados acima, é possível calcular $\langle m | \hat{I} | n \rangle$ substituindo as equações (3.5) e (3.6) na equação (3.4), de modo que:

$$\langle m | \hat{I} | n \rangle = \frac{ie}{2\hbar} (E_m - E_n) \langle m | N_R - N_L | n \rangle. \quad (3.11)$$

Em fim, é possível usar a definição de ΔH_0 da equação (3.3) para obter:

$$\langle m | \hat{I} | n \rangle = \frac{1}{i\hbar \Delta V} (E_m - E_n) \langle m | \Delta H_0 | n \rangle. \quad (3.12)$$

3.1 Teoria de perturbação para o cálculo da condutância em regime de resposta linear

Para continuar o cálculo da condutância será utilizada a teoria de perturbação. O objetivo é construir a base, que vai permitir encontrar uma fórmula para a condutância, que seja possível de ser implementada numericamente. Assim, escrevendo o operador de evolução temporal na representação de interação utilizando a série de Dyson, temos:

$$U_I(t, t_0) = \mathbf{1} - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t \Delta H_I(t') U_I(t', t_0) dt', \quad (3.13)$$

onde foi usado

$$\Delta H_I(t') = e^{iH_0 t'/\hbar} \Delta H(t') e^{-iH_0 t'/\hbar}. \quad (3.14)$$

Será utilizada a aproximação até primeira ordem na equação 3.13, pois ao final vamos analisar a razão entre a corrente elétrica e a diferença de potencial no limite de diferença de potencial tendendo a zero. Temos:

$$U_I(t, t_0) = \mathbf{1} - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t \Delta H_I(t') dt'. \quad (3.15)$$

Com o operador de evolução temporal, calculamos $\langle n_I(t) | \hat{I}_I | n_I(t) \rangle$ da forma:

$$\langle n_I(t) | \hat{I}_I | n_I(t) \rangle = \langle n_I(t_0) | U_I^\dagger(t, t_0) \hat{I}_I U_I(t, t_0) | n_I(t_0) \rangle. \quad (3.16)$$

Substituindo a equação (3.15) na equação (3.16) obtemos:

$$\langle n_I(t) | \hat{I}_I | n_I(t) \rangle = \langle n_I(t_0) | \left[\mathbf{1} + \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t \Delta H_I^\dagger(t') dt' \right] \hat{I}_I \left[\mathbf{1} - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t \Delta H_I(t') dt' \right] | n_I(t_0) \rangle. \quad (3.17)$$

Mantendo apenas os termos de primeira ordem de ΔH_I , a equação fica:

$$\begin{aligned} \langle n_I(t) | \hat{I}_I | n_I(t) \rangle &= \langle n_I(t_0) | \hat{I}_I | n_I(t_0) \rangle \\ &- \langle n_I(t_0) | \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t \Delta H_I^\dagger(t') dt' \hat{I}_I | n_I(t_0) \rangle \\ &+ \langle n_I(t_0) | \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t \Delta H_I(t') dt' \hat{I}_I | n_I(t_0) \rangle + O((\Delta H_I)^2). \end{aligned} \quad (3.18)$$

Deste ponto em diante será considerado $|n(t_0)\rangle \equiv |n\rangle$ e $|n_I(t_0)\rangle \equiv |n_I\rangle$.

Utilizando a relação de completeza $\sum_m |m_I\rangle \langle m_I| = \mathbf{1}$ na equação (3.18), temos:

$$\begin{aligned} \langle n_I(t) | \hat{I}_I | n_I(t) \rangle &= \langle n_I | \hat{I}_I | n_I \rangle \\ &+ \sum_m \frac{1}{i\hbar} \langle n_I | \hat{I}_I | m_I \rangle \langle m_I | \int_{t_0}^t \Delta H_I(t') dt' | n_I \rangle \\ &- \sum_m \frac{1}{i\hbar} \langle n_I | \int_{t_0}^t \Delta H_I^\dagger(t') dt' | m_I \rangle \langle m_I | \hat{I}_I | n_I \rangle. \end{aligned} \quad (3.19)$$

O próximo passo será resolver $\frac{1}{i\hbar} \langle m_I | \int_{t_0}^t \Delta H_I(t') dt' | n_I \rangle$ presente na equação (3.19). Encontramos:

$$\begin{aligned} \frac{1}{i\hbar} \langle m_I | \int_{t_0}^t \Delta H_I(t') dt' | n_I \rangle &= \frac{1}{i\hbar} \langle m_I | \int_{t_0}^t e^{iH_0 t'/\hbar} \Delta H(t') e^{-iH_0 t'/\hbar} dt' | n_I \rangle, \\ &= \frac{1}{i\hbar} \langle m_I | \Delta H_0 | n_I \rangle \int_{t_0=-\infty}^t e^{i(E_m - E_n)t'/\hbar} e^{i\omega t' + \eta t'} dt', \\ &= \frac{1}{i\hbar} \langle m_I | \Delta H_0 | n_I \rangle \frac{e^{i\omega_{mn}t + i\omega t + \eta t}}{i\omega_{mn} + i\omega + \eta}, \\ &= \frac{1}{i\hbar} \langle m_I | \Delta H_{0I} | n_I \rangle \frac{e^{i\omega t + \eta t}}{i\omega_{mn} + i\omega + \eta}, \end{aligned} \quad (3.20)$$

onde foi usado:

$$\frac{(E_m - E_n)}{\hbar} \equiv \omega_{mn}. \quad (3.21)$$

Para completar as manipulações matemáticas, será utilizada a equação (3.12), de modo ser possível escrever:

$$\frac{1}{i\hbar} \langle m_I | \int_{t_0}^t \Delta H_I(t') dt' | n_I \rangle = \Delta V \langle m_I | \hat{I}_I | n_I \rangle \frac{e^{i\omega t + \eta t}}{i\omega_{mn} + i\omega + \eta} \times \frac{1}{(E_m - E_n)}. \quad (3.22)$$

Substituindo a equação (3.22) na equação (3.19), ficamos com

$$\begin{aligned} \langle n_I(t) | \hat{I}_I | n_I(t) \rangle &= \langle n_I | \hat{I}_I | n_I \rangle \\ &+ \sum_m \Delta V |\langle n | \hat{I} | m \rangle|^2 \frac{e^{i\omega t + \eta t}}{i\omega_{mn} + i\omega + \eta} \times \frac{1}{(E_m - E_n)} \\ &- \sum_m \Delta V |\langle n | \hat{I} | m \rangle|^2 \frac{e^{i\omega t + \eta t}}{i\omega_{nm} + i\omega + \eta} \times \frac{1}{(E_n - E_m)}. \end{aligned} \quad (3.23)$$

Na manipulação da equação (3.20), foi usado que $t_0 \rightarrow -\infty$ no intervalo da integral, a justificativa para isso é o interesse no potencial da equação (3.2) estar desligado no tempo $t_0 \rightarrow -\infty$, e para isso ocorrer temos o termo $e^{\eta t}$, que garante que o potencial seja nulo, mas para não acarretar problemas do potencial crescer exponencialmente com o tempo será feito $\eta \rightarrow 0$.

Assim, calculando o termo $\frac{1}{i\omega_{nm} + i\omega + \eta}$ da equação (3.23), temos:

$$\frac{1}{i\omega_{nm} + i\omega + \eta} = i \left[\frac{-(\omega + \omega_{nm})}{(\omega + \omega_{nm})^2 + \eta^2} - \frac{i\eta}{(\omega + \omega_{nm})^2 + \eta^2} \right]. \quad (3.24)$$

Aplicando o limite para $\eta \rightarrow 0$, encontramos a delta de Dirac,

$$\lim_{\eta \rightarrow 0} \frac{\eta}{(\omega + \omega_{nm})^2 + \eta^2} = \pi \delta(\omega + \omega_{nm}). \quad (3.25)$$

Por fim, obtemos:

$$\lim_{\eta \rightarrow 0} \frac{1}{i\omega_{nm} + i\omega + \eta} = - \lim_{\eta \rightarrow 0} \frac{i(\omega + \omega_{nm})}{(\omega + \omega_{nm})^2 + \eta^2} + \pi \delta(\omega + \omega_{nm}), \quad (3.26)$$

onde será definido \bar{P} como o valor principal,

$$\bar{P}(\omega + \omega_{nm}) = \lim_{\eta \rightarrow 0} \frac{i(\omega + \omega_{nm})}{(\omega + \omega_{nm})^2 + \eta^2}. \quad (3.27)$$

Calculados os limites acima é possível substituir os resultados na equação (3.23), considerando que $\langle n | \hat{I} | n \rangle = 0$, de modo que não tenha corrente no tempo $t_0 = -\infty$, obtêm-se o seguinte resultado:

$$\begin{aligned} \langle n_I(t) | \hat{I}_I | n_I(t) \rangle &= \sum_m \Delta V | \langle n | \hat{I} | m \rangle |^2 e^{i\omega t} \pi \left(\delta(\omega + \omega_{mn}) - \bar{P}(\omega + \omega_{nm}) \right) \times \frac{1}{(E_m - E_n)} \\ &\quad - \sum_m \Delta V | \langle n | \hat{I} | m \rangle |^2 e^{i\omega t} \pi \left(\delta(\omega + \omega_{nm}) - \bar{P}(\omega + \omega_{mn}) \right) \times \frac{1}{(E_n - E_m)}. \end{aligned} \quad (3.28)$$

O próximo passo será calcular o valor esperado da corrente, para isso será usado:

$$\langle \hat{I} \rangle_{(t)} = \sum_n P_n \langle n(t) | \hat{I} | n(t) \rangle, \quad (3.29)$$

onde P_n é a probabilidade termodinâmica do estado n ser encontrado, dada por:

$$P_n = \frac{e^{-\beta E_n}}{Z}. \quad (3.30)$$

É possível usar a definição da equação (3.29) e aplicar o limite $\omega \rightarrow 0$, onde agora não é mais uma corrente alternada. O limite $\omega \rightarrow 0$ será aplicado em etapas para melhor compreensão de como se chegou ao resultado final. Na primeira etapa será feito $e^{i\omega t} \rightarrow 1$, permitindo escrever a parte real da corrente como:

$$\begin{aligned} \text{Re} \left\{ \frac{\sum_n P_n \langle n(t) | \hat{I} | n(t) \rangle}{\Delta V} \right\} &= \sum_n \frac{e^{-\beta E_n}}{Z} \sum_m | \langle n | \hat{I} | m \rangle |^2 \pi \delta(\hbar\omega + E_{mn}) \times \frac{\hbar}{(E_{mn})} \\ &\quad - \sum_n \frac{e^{-\beta E_n}}{Z} \sum_m | \langle n | \hat{I} | m \rangle |^2 \pi \delta(\hbar\omega + E_{nm}) \times \frac{\hbar}{(E_{nm})}, \end{aligned} \quad (3.31)$$

onde foi usado:

$$E_{nm} \equiv E_n - E_m. \quad (3.32)$$

Usando a definição de condutância é possível usar a equação (3.31) para escrever:

$$\text{Re}\{G\} = \text{Re} \left\{ \frac{\sum_n P_n \langle n(t) | \hat{I} | n(t) \rangle}{\Delta V} \right\}. \quad (3.33)$$

Fazendo uma troca de índices mudos e trocando $E_{mn} \rightarrow \omega$ e $E_{nm} \rightarrow \omega$ por causa do delta de Dirac, a equação (3.31) torna-se:

$$\text{Re}\{G\} = \frac{\pi}{Z} \sum_{m,n} \left(e^{-\beta E_n} - e^{-\beta E_m} \right) | \langle n | \hat{I} | m \rangle |^2 \frac{e^{i\omega t}}{\omega} \delta(\hbar\omega - E_{mn}). \quad (3.34)$$

Por fim, é possível aplicar o limite de $\omega \rightarrow 0$ nos termos que restam, de modo que seja uma corrente do tipo DC,

$$\lim_{\omega \rightarrow 0} \frac{e^{-\beta E_n} - e^{-\beta E_m}}{\omega} = \lim_{\omega \rightarrow 0} \frac{e^{-\beta E_n} - e^{-\beta(E_n + \hbar\omega)}}{\omega} = e^{-\beta E_n} \beta \hbar, \quad (3.35)$$

obtendo assim uma equação para a condutância na forma de:

$$\text{Re}\{G\} = \frac{\pi}{Z} \sum_{m,n} e^{-\beta E_n} |\langle n | \hat{I} | m \rangle|^2 \frac{\hbar}{k_B T} \delta(E_n - E_m). \quad (3.36)$$

3.2 Caso desacoplado ($U_0 = 0$)

Construída uma fórmula para o cálculo da condutância, nesta seção será discutido o caso em que é possível desacoplar as bandas de elétrons. Como já foi discutido, quando não existe o parâmetro U_0 para acoplar as duas bandas, é possível fazer a troca para os operadores pares e ímpares de modo que apenas os operadores pares tenham acoplamento com o ponto quântico. Sendo assim, usando que a banda ímpar e a par estão desacopladas, a hamiltoniana fica:

$$H = \sum_k \epsilon_k o_k^\dagger o_k + \sum_k \epsilon_k e_k^\dagger e_k + \sqrt{2}V \sum_k (e_k^\dagger c_d + h.c.) + H_{PQ}. \quad (3.37)$$

O operador ϵ_k par é dado por:

$$e_k = \frac{c_{kL} + c_{kR}}{\sqrt{2}}. \quad (3.38)$$

E o operador o_k ímpar é dado por:

$$o_k = \frac{c_{kL} - c_{kR}}{\sqrt{2}}. \quad (3.39)$$

Utilizando as definições de \hat{I} da equação (3.4), é possível escrever a partir das equações (3.38) e (3.39) uma fórmula para o operador corrente na forma de

$$\hat{I} = \frac{eV}{2i\hbar} \sum_k \sqrt{2} (c_d^\dagger o_k - o_k^\dagger c_d), \quad (3.40)$$

de modo que

$$\langle m | \hat{I} | n \rangle = \frac{eV}{\sqrt{2}\hbar} i \langle m | \sum_k (o_k^\dagger c_d - c_d^\dagger o_k) | n \rangle. \quad (3.41)$$

Agora é possível usar o fato das bandas pares e ímpares serem desacopladas para separar o auto-vetor $|n\rangle$ nas suas partes pares e ímpares, obtendo

$$|n\rangle = |n\rangle_{\text{odd}} \otimes |n\rangle_{\text{even}}, \quad (3.42)$$

tendo como energias $E_n = E_{ne} + E_{no}$, sendo E_{ne} a contribuição do estado par e E_{no} a contribuição do estado ímpar para a energia do estado $|n\rangle = |ne\rangle \times |no\rangle$ para encontrar

$$\langle m | \hat{I} | n \rangle = \frac{eV}{\sqrt{2}} \frac{i}{\hbar} \langle m |_{\text{even}} \otimes \langle m |_{\text{odd}} \sum_k (o_k^\dagger c_d - c_d^\dagger o_k) | n \rangle_{\text{odd}} \otimes | n \rangle_{\text{even}}. \quad (3.43)$$

Como c_d é apenas acoplado com e_k , é possível escrever

$$\langle m | \hat{I} | n \rangle = \sum_k \frac{eV}{\sqrt{2}} \frac{i}{\hbar} \left(\langle m |_{\text{odd}} o_k^\dagger | n \rangle_{\text{odd}} \langle m |_{\text{even}} c_d | n \rangle_{\text{even}} - \langle m |_{\text{even}} c_d^\dagger | n \rangle_{\text{even}} \langle m |_{\text{odd}} o_k | n \rangle_{\text{odd}} \right). \quad (3.44)$$

Vamos denotar por $n(k, m)$ a ocupação do nível k da banda ímpar no seu auto-estado de muitos corpos $|m\rangle_{\text{odd}}$,

$$n(k, m) = \langle m |_{\text{odd}} o_k^\dagger o_k | m \rangle_{\text{odd}}. \quad (3.45)$$

Como estamos tratando de elétrons (férmions), ou $n(k, m)$ será igual a 1 ou será igual a 0.

Desse modo, é possível concluir que $\langle m |_{\text{odd}} o_k | n \rangle_{\text{odd}}$ e $\langle m |_{\text{odd}} o_k^\dagger | n \rangle_{\text{odd}}$ não podem ser diferentes de zero ao mesmo tempo. Por exemplo, caso a ocupação média $n(k, n)$ for igual a 1, já existirá um elétron no nível k em $|n\rangle_{\text{odd}}$, fazendo $\langle m |_{\text{odd}} o_k^\dagger | n \rangle_{\text{odd}}$ ser igual a zero, enquanto que o operador de aniquilação ainda poderá operar, gerando um $\langle m |_{\text{odd}} o_k | n \rangle_{\text{odd}}$ diferente de zero. Com esse raciocínio, é possível escrever

$$\langle m |_{\text{odd}} o_k^\dagger | n \rangle_{\text{odd}} = (1 - n(k, n)), \quad (3.46)$$

para um específico estado $|m\rangle_{\text{odd}}$, que é em tudo igual a $|n\rangle_{\text{odd}}$, exceto no nível k , sendo possível escrever a seguinte relação entre as energias desses estados

$$E_{mo} = E_{no} + \epsilon_k. \quad (3.47)$$

Nesse caso, $\langle m |_{\text{odd}} o_k^\dagger | n \rangle_{\text{odd}}$ não depende do spin (σ). Analisando o caso em que $\langle m |_{\text{odd}} o_k^\dagger | n \rangle_{\text{odd}}$ é o termo diferente de zero, temos:

$$\langle \hat{I} \rangle = \frac{\Delta V \pi \hbar e^2 V^2}{Z k_B T} \frac{1}{2\hbar} \sum_{ne, me, no, k} (1 - n(k, n)) e^{-\beta(E_{no} + E_{ne})} |\langle m |_{\text{e}} c_d | n \rangle_{\text{e}}|^2 \times \delta(E_{ne} - E_{me} - \epsilon_k), \quad (3.48)$$

onde foi usado:

$$\lim_{\omega \rightarrow 0} \delta(\hbar\omega - E_{mn}) = \delta(E_{ne} - E_{me} + E_{no} - E_{mo}) = \delta(E_{ne} - E_{me} - \epsilon_k). \quad (3.49)$$

Sendo $f(k)$ a distribuição de Fermi-Dirac, ela corresponde à ocupação média do nível k ,

$$f(k) = \sum_{no} \frac{e^{-\beta E_{no}}}{Z_o} (n(k)), \quad (3.50)$$

onde a função partição da parte ímpar é Z_o . Sendo Z_e a função partição da parte par, a função partição do sistema completo é $Z = Z_e Z_o$. Quando realizada a média, encontramos (estamos fazendo potencial químico igual a zero)

$$f(k) = \frac{1}{e^{\beta\epsilon_k} + 1}. \quad (3.51)$$

Além disso, vamos passar a soma a discreta nos momentos da banda ímpar para o limite do contínuo, o que nos permite tirar proveito da função delta de Dirac, obtendo

$$\sum_k (1 - f(k)) \delta(E_{ne} - E_{me} - \epsilon_k) \rightarrow \int d\epsilon_k \rho(1 - f(\epsilon_k)) \delta(E_{ne} - E_{me} - \epsilon) = \rho(1 - f(E_{ne} - E_{me})), \quad (3.52)$$

que substituída na equação 3.48, nos dá

$$\langle \hat{I} \rangle = \frac{\Delta V \pi \hbar}{Z_e k_B T} \frac{e^2 V^2}{2 \hbar^2} \rho \sum_{ne, me} (1 - f(E_{ne} - E_{me})) e^{-\beta E_{ne}} |\langle m|_{even} c_d |n\rangle_{even}|^2. \quad (3.53)$$

A equação (3.53) foi conseguida realizando a análise do caso em que $\langle m|_{odd} o_k^\dagger |n\rangle_{odd}$ é diferente de zero. A mesma análise pode ser feita para o caso em que $\langle m|_{odd} o_k |n\rangle_{odd}$ é diferente de zero, a única diferença será que

$$\langle m|_{odd} o_k |n\rangle_{odd} = n(k, n), \quad (3.54)$$

sendo possível escrever a seguinte relação entre as energias

$$E_{no} = E_{mo} + \epsilon_k. \quad (3.55)$$

Para simplificar a notação será utilizado $|n\rangle_e$ no lugar de $|n\rangle_{even}$ deste ponto em diante do texto.

Todo o resto segue como foi feito no caso anterior, obtendo assim

$$\langle \hat{I} \rangle = \frac{\Delta V \pi \hbar}{Z_e k_B T} \frac{e^2 V^2}{2 \hbar^2} \rho \sum_{ne, me} (f(E_{me} - E_{ne})) e^{-\beta E_{ne}} |\langle m|_e c_d^\dagger |n\rangle_e|^2. \quad (3.56)$$

O próximo passo é fazer a análise do termo $(1 - f(E_{ne} - E_{me})) e^{-\beta E_{ne}}$ da equação (3.53) e o termo $(f(E_{me} - E_{ne})) e^{-\beta E_{ne}}$ da equação (3.56). Aplicando a definição da distribuição de Fermi-Dirac da equação (3.51), encontramos

$$((1 - f(E_{ne} - E_{me})) e^{-\beta E_{ne}}) = \left[1 - \frac{1}{e^{\beta(E_{ne} - E_{me})} + 1} \right] e^{-\beta E_{ne}} = \frac{1}{e^{\beta E_{ne}} + e^{\beta E_{me}}} \quad (3.57)$$

e

$$(f(E_{me} - E_{ne})) e^{-\beta E_{ne}} = \frac{e^{-\beta E_{ne}}}{e^{\beta(E_{me} - E_{ne})} + 1} = \frac{1}{e^{\beta E_{me}} + e^{\beta E_{ne}}}. \quad (3.58)$$

Também é possível alterar o termo $|\langle m|_e c_d^\dagger |n\rangle_e|^2$, de forma que

$$\begin{aligned} |\langle m|_e c_d^\dagger |n\rangle_e|^2 &= \langle m|_e c_d^\dagger |n\rangle_e \langle n|_e c_d |m\rangle_e, \\ &= \langle n|_e c_d |m\rangle_e \langle m|_e c_d^\dagger |n\rangle_e, \\ &= |\langle n|_e c_d |m\rangle_e|^2. \end{aligned} \quad (3.59)$$

Como m_e e n_e são variáveis mudas é possível fazer $m_e \rightarrow n_e$ e $n_e \rightarrow m_e$ no caso em que $\langle m|_{odd} o_k |n\rangle_{odd}$ é diferente de zero, fazendo a equação (3.56) ficar:

$$\langle \hat{I} \rangle = \frac{\Delta V \pi \hbar e^2 V^2}{Z_e k_B T} \frac{1}{2 \hbar^2} \rho \sum_{n_e, m_e} \frac{1}{e^{\beta E_{n_e}} + e^{\beta E_{m_e}}} |\langle m|_e c_d |n\rangle_e|^2. \quad (3.60)$$

Fazendo as substituições da equação (3.57) na equação em que $\langle m|_{odd} o_k^\dagger |n\rangle_{odd}$ é diferente de zero, também é obtida a equação (3.60). De modo que, somando ambos os casos ($\langle m|_{odd} o_k^\dagger |n\rangle_{odd}$ ou $\langle m|_{odd} o_k |n\rangle_{odd}$ diferentes de zero), é obtida a seguinte fórmula para a corrente

$$\langle \hat{I} \rangle = \frac{\Delta V \pi \hbar e^2 V^2}{Z_e k_B T} \frac{1}{\hbar^2} \rho \sum_{n_e, m_e} \frac{1}{e^{\beta E_{n_e}} + e^{\beta E_{m_e}}} |\langle m|_e c_d |n\rangle_e|^2. \quad (3.61)$$

Tendo uma equação para $\langle \hat{I} \rangle$ é possível construir uma fórmula para a condutância. No caso, será calculado $\frac{G}{\frac{2e^2}{h}}$, onde $\frac{2e^2}{h}$ é chamado de quantum da condutância, obtendo por fim uma forma para o cálculo da condutância do caso desacoplado, a qual pode ser implementada numericamente tendo os autoestados do sistema,

$$\frac{G}{\frac{2e^2}{h}} = \pi \rho V^2 \frac{\pi}{Z_e k_B T} \sum_{n_e, m_e} \frac{1}{e^{\beta E_{n_e}} + e^{\beta E_{m_e}}} |\langle m|_e c_d |n\rangle_e|^2. \quad (3.62)$$

3.3 Gráficos da condutância no caso desacoplado

Para ilustrar o que foi discutido na seção anterior sobre o caso desacoplado, foram feitos gráficos da condutância em função da temperatura. Consideramos um ponto quântico simétrico, com

$$2\epsilon_d + U_d = 0.$$

Analisando os gráficos é possível ver a presença de um pico na região de altas energias. Esse pico ocorre em temperaturas $\frac{k_B T}{D} \approx \epsilon_d$ (aqui $\epsilon_d = 0.02$, sendo possível observar os picos aparecendo na região de $\frac{k_B T}{D} \approx 10^{-2}$). Esse pico está associado com as transições do estado fundamental ocupado individualmente para as configurações duplamente ocupada e vazia do ponto quântico, que são degeneradas na situação simétrica ($2\epsilon_d + U_d = 0$).

O aspecto mais marcante da dependência com a temperatura é o aumento da condutância quando a temperatura abaixa e sai do regime de $T \gg T_K$ e vai para a região de $T \ll T_K$. A temperatura abaixando o suficiente começa a ressonância de Kondo, que vai levar o sistema do ponto fixo de momento localizado para o ponto fixo fortemente acoplado, onde o nível do ponto quântico e o nível da banda próximo ao ponto quântico ficam acoplados formando um singleto. À medida que a temperatura baixa, o acoplamento entre o momento localizado e os elétrons de condução torna-se mais intenso, promovendo maior transferência de elétrons de um lado para o outro do ponto quântico (da mesma forma que produz mais espalhamento no caso de ligas metálicas). Não fosse pelo efeito Kondo, teríamos o bloqueio coulombiano, uma vez que os estados vazios e duplamente ocupados no ponto quântico estão separados por $|\epsilon_d|$ da configuração de menor energia com um elétron.

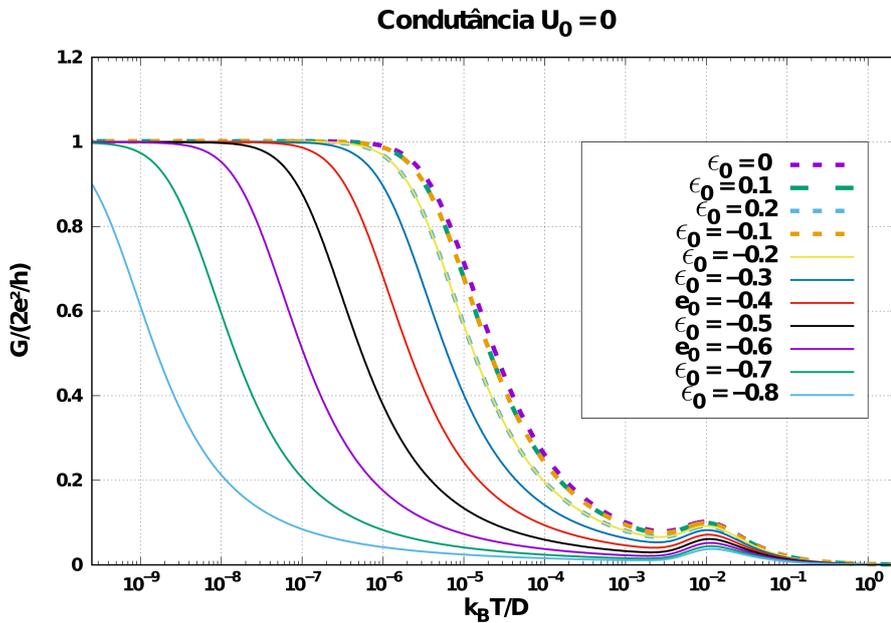


Figura 23 — Gráfico da condutância em função da temperatura utilizando diferentes valores de ϵ_0 em cada curva. Nesse gráfico foram utilizados os mesmos parâmetros do gráfico da figura 7.

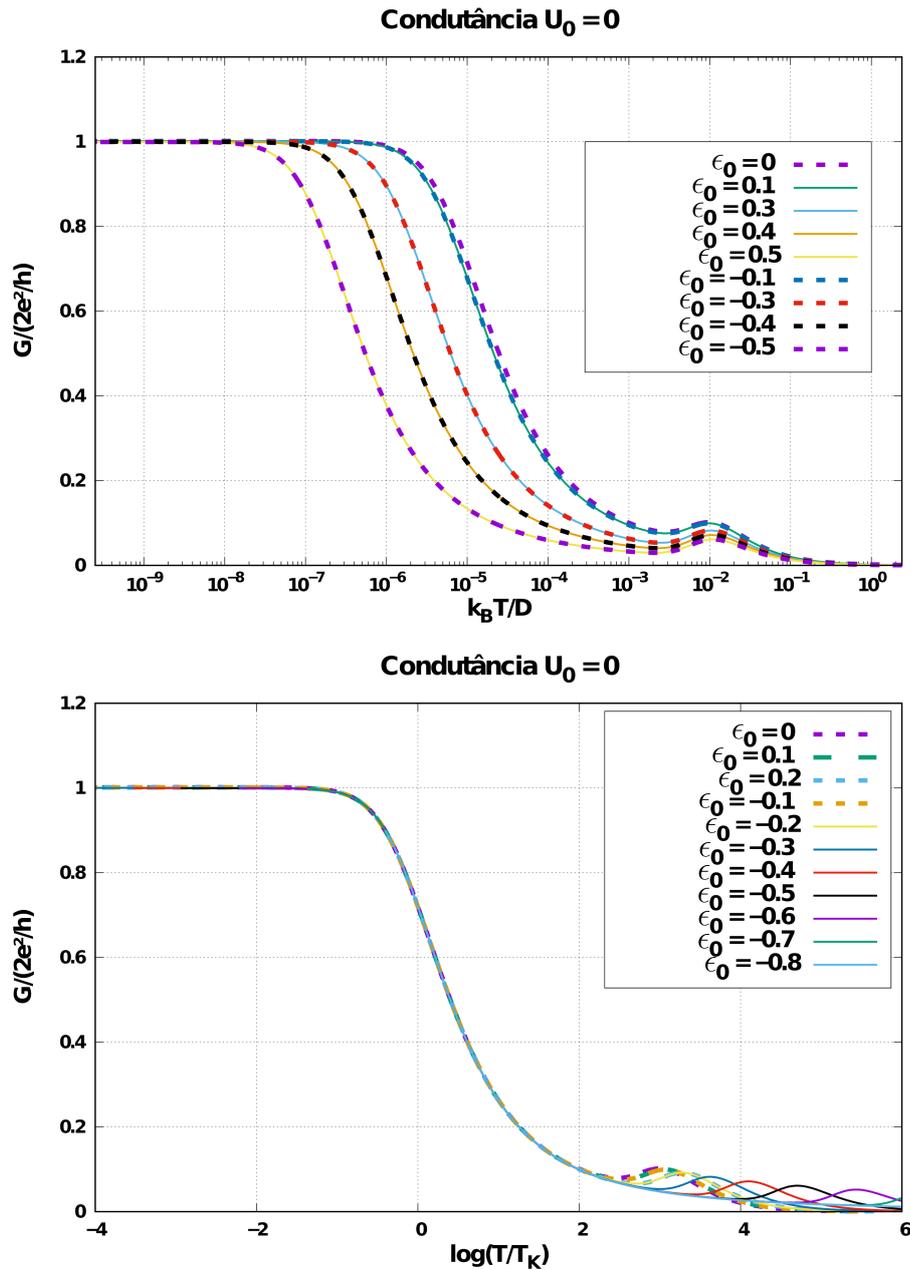


Figura 24 – Painel superior: Gráficos da condutância em função da temperatura. O objetivo é comparar o efeito de utilizar valores positivos para ϵ_0 , da mesma forma que ocorre com as propriedades termodinâmicas, com $U_0 = 0$, as curvas para os valores positivos e negativos de ϵ_0 ficam sobrepostas. Nesse gráfico foram utilizados os mesmos parâmetros do gráfico da figura 7. Painel inferior: Gráfico da condutância em função de T/T_K . Nesse gráfico é possível ver a característica universal da curva, onde a mudança nos parâmetros causa apenas deslocamento na temperatura Kondo. Nesse gráfico foram utilizados os mesmos parâmetros do gráfico da figura 7.

3.4 Caso acoplado

A fórmula para o cálculo da condutância da equação (3.62) não funciona para o caso quando as bandas de condução estão acopladas, dado que não é mais válida a equação (3.42) que separa os autoestados das bandas pares e ímpares.

Para o caso acoplado, o operador corrente pode ser escrito a partir do operador $f_{I0\sigma}$,

$$\hat{I} = \frac{De}{\sqrt{2i\hbar}} \sqrt{\frac{2\Gamma}{\pi D}} \sum_{\sigma} \left(c_{d\sigma}^{\dagger} f_{I0\sigma} - f_{I0\sigma}^{\dagger} c_{d\sigma} \right). \quad (3.63)$$

Usando a definição acima na equação (3.36), é possível escrever a condutância como:

$$\frac{G}{\frac{2e^2}{h}} = \frac{\langle \hat{I} \rangle}{\Delta V} / \frac{2e^2}{h} = \frac{\pi\Gamma}{\frac{k_B T}{D}} \frac{1}{Z} \sum_{n,m} e^{-\beta E_n} |\langle m | (c_{d\sigma}^{\dagger} f_{I0\sigma} - f_{I0\sigma}^{\dagger} c_{d\sigma}) | n \rangle|^2 \delta(E_m - E_n). \quad (3.64)$$

Onde é usado $\Gamma = \pi\rho V^2$. Como não é possível separar os autoestados em uma parte par e outra ímpar, serão feitas algumas manipulações matemáticas para prosseguir na análise. Começamos por

$$\frac{G}{\frac{2e^2}{h}} = \frac{\pi\Gamma}{\frac{k_B T}{D}} \frac{1}{Z} \sum_{n,m} e^{-\beta E_n} \left[\sum_{l,\sigma} \langle l | c_{d\sigma} | m \rangle \langle l | f_{I0\sigma} | n \rangle - \langle l | f_{I0\sigma} | m \rangle \langle l | c_{d\sigma} | n \rangle \right]^2 \delta(E_m - E_n), \quad (3.65)$$

onde é possível usar os invariantes para conseguir escrever a condutância sem a dependência explícita do spin,

$$\frac{G}{\frac{2e^2}{h}} = \frac{\pi\Gamma}{\frac{k_B T}{D}} \frac{1}{Z} \sum_{n,m} e^{-\beta E_n} \left[\sum_l \langle l | c_d | m \rangle \langle l | f_{I0} | n \rangle - \langle l | f_{I0} | m \rangle \langle l | c_d | n \rangle \right]^2 \delta(E_m - E_n). \quad (3.66)$$

Foi usado que os estados m e n sempre estão no mesmo subespaço de (Q, S) . A troca do elemento de matriz dos operadores para o invariante é feita seguindo a equação (1.53) da seção 1.4.3 referente aos invariantes. No caso da equação (3.66) acima, a somatória do quadrado dos coeficientes de Clebsch–Gordan nos spins será igual a 1.

Para facilitar a notação e evitar confusão com os índices, no lugar de m e n serão usados R e R' para indicar que pertencem ao mesmo subespaço de (Q, S) , de modo que é preciso calcular numericamente o termo que vai depender apenas dos estados R e R' , que será chamado de $\langle R | \widehat{Corr} | R' \rangle$

$$\langle R | \widehat{Corr} | R' \rangle = \left[\sum_l \langle l | c_d | R \rangle \langle l | f_{I0} | R' \rangle - \langle l | f_{I0} | R \rangle \langle l | c_d | R' \rangle \right]. \quad (3.67)$$

Além disso, existe o problema de como lidar com a delta de Dirac da equação (3.66), que causa problemas quando for realizar os cálculos numéricos, necessariamente envolvendo estados discretos. A próxima seção será dedicada a discutir a forma que foi criada para aplicar se lidar com a delta de Dirac no problema deste trabalho.

3.5 Resolvendo o delta de Dirac

Como pode ser visto na equação (3.66), a fórmula para calcular a condutância contém uma delta de Dirac, o problema vem do fato que a equação será calculada numericamente e não estaremos num contínuo de energias.

Como, numa primeira análise, não é possível aplicar a delta de Dirac em alguma integral, como feito no caso desacoplado, foram feitas algumas tentativas para resolver a delta de Dirac numericamente.

O método que teve êxito em conseguir resolver a delta de Dirac, nesse caso específico, foi criar uma integral utilizando o parâmetro z , visto que tentativas de trocar a delta de Dirac por funções que em algum limite equivalem à delta de Dirac não tiveram sucesso. O objetivo foi criar uma integral que permitirá aplicar a delta de Dirac na mesma, construindo uma fórmula equivalente ao do caso desacoplado.

Para realizar a integral foi usado o fato que computacionalmente, o programa que calcula os autovalores e autoestados separa o problema nas bandas par e ímpar. Mesmo que as duas bandas estejam acopladas, existe uma separação dos seus autovalores e cada banda tem um parâmetro z próprio, z_P para a parte par e z_I para a parte ímpar.

Assim, é possível introduzir uma integral em z_I através de uma média em z_I ,

$$\frac{G(z_P)}{\frac{2e^2}{h}} = \frac{\pi\Gamma}{\frac{k_B T}{D}} \frac{\int dz_I \sum_{n,m} \frac{e^{-\beta E_n(z_P, z_I)}}{Z(z_P, z_I)} \left[\langle m | \widehat{C}orr | n \rangle (z_P, z_I) \right]^2 \delta(E_m(z_P, z_I) - E_n(z_P, z_I))}{\int dz_I}. \quad (3.68)$$

Fazendo os limites da integral em z_I irem de 0 a 1, obtemos

$$\frac{G(z_P)}{\frac{2e^2}{h}} = \frac{\pi\Gamma}{\frac{k_B T}{D}} \int dz_I \sum_{n,m} \frac{e^{-\beta E_n(z_P, z_I)}}{Z(z_P, z_I)} \left[\langle m | \widehat{C}orr | n \rangle (z_P, z_I) \right]^2 \delta(E_m(z_P, z_I) - E_n(z_P, z_I)). \quad (3.69)$$

Aplicando a delta de Dirac na integral em z_I , é possível encontrar uma nova equação para o cálculo da condutância, agora sem mais o problema de ter de resolver numericamente a delta de Dirac,

$$\frac{G(z_P)}{\frac{2e^2}{h}} = \frac{\pi\Gamma}{\frac{k_B T}{D}} \sum_{n,m}^* \frac{e^{-\beta E_n(z_P, z_I^*)}}{Z(z_P, z_I^*)} \frac{\left[\langle m | \widehat{C}orr | n \rangle (z_P, z_I^*) \right]^2}{\left| \frac{dE_{mn}}{dz_I} (z_P, z_I^*) \right|}. \quad (3.70)$$

Vale observar que a somatória da equação (3.70) possui um asterisco para indicar que apenas os pares de autoestados (m, n) com as mesmas energias são considerados na somatória, respeitando a delta de Dirac. Como são obtida diferentes energias para diferentes valores de z_I e z_P , quando um valor de z_I permite que $(E_m(z_P, z_I) = E_n(z_P, z_I))$, ele será chamado de z_I^* , para indicar que é um ponto de cruzamento das energias.

A dificuldade inerente do procedimento vem do fato de ser preciso calcular as diferentes componentes da equação (3.70) nos pontos de cruzamentos z_I^* , e também, ter que achar diversos autovalores e autoestados para uma grande quantidade de valores para o parâmetro z_I .

Na prática, para resolver o problema com os recursos computacionais que estão

disponíveis, a integral em z_I , será calculada como uma somatória em z_I , com valores que vão de 0 a 1 com um passo de 0.1 (0, 0.1, 0.2, 0.3...0.9, 1).

Os pontos z_I^* , onde as energias cruzam, serão calculados fazendo interpolação linear na escala logarítmica. O objetivo é melhorar a precisão dos resultados gerados, de modo que os valores de z_I^* não fiquem limitados ao passo de 0.1 escolhido, mas ao mesmo tempo é um método simples com menor custo computacional.

3.5.1 Aplicando no caso desacoplado

Para testar a viabilidade do método, vamos primeiro utilizá-lo no caso que pode ser desacoplado, mas que será tratado mantendo-se as somas discretas em ambas as bandas, sem tomar o limite do contínuo na banda ímpar, como feito anteriormente. O objetivo é poder comparar os resultados obtidos com os resultados da equação (3.16), de forma a poder validar o método proposto na seção 3.5.

Considerando que a hamiltoniana do caso desacoplado, equação (3.37), tenha autoestados que formam dois conjuntos distintos, $g_{k,p}$ e $g_{k,i}$. Como a hamiltoniana é desacoplada, os estados pares estão desacoplados dos ímpares, os autoestados também terão um conjunto par e um conjunto ímpar desacoplados um do outro.

Assim, utilizando os autoestados, ($g_{k,p}$ e $g_{k,i}$), e a definição da corrente da equação (3.63), é possível escrever os operadores c_d e f_{0I} na base dos autoestados:

$$c_d = \sum_k \gamma_k g_{k,P}. \quad (3.71)$$

$$f_{0I} = \sum_k \alpha_k g_{k,I}. \quad (3.72)$$

Onde γ_k e α_k são as projeções de c_d e f_{0I} nos autoestados da hamiltoniana desacoplada.

Utilizando o resultado acima, obtemos:

$$\left(c_{d\sigma}^\dagger f_{i0\sigma} - f_{i0\sigma}^\dagger c_{d\sigma} \right) = \sum_k \sum_q \gamma_k \alpha_q (g_{k,P}^\dagger g_{q,I} - g_{q,I}^\dagger g_{k,P}). \quad (3.73)$$

É possível observar dois casos mutuamente exclusivos. O primeiro caso é o que $|m\rangle = g_{k',P}^\dagger g_{q',I} |n\rangle$, onde o nível (q', I) está ocupado em $|n\rangle$, enquanto que o nível (k', P) deve estar desocupado em $|n\rangle$. O outro caso é o que $|m\rangle = g_{k',P}^\dagger g_{q',I} |n\rangle$, onde o nível (q', I) está desocupado em $|n\rangle$, enquanto que o nível (k', P) deve estar ocupado em $|n\rangle$.

Como os dois casos não acontecem simultaneamente, é possível trabalhar separadamente com eles e somar as contribuições posteriormente. A equação (3.56) pode ser

reescrita como:

$$\frac{G}{\frac{2e^2}{h}} = \frac{\pi\Gamma}{\frac{k_B T}{D}} \frac{1}{Z} \sum_{n,m} e^{-\beta E_n} \left| \sum_k \sum_q \langle m | \gamma_k \alpha_q (g_{k,P}^\dagger g_{q,I} - g_{q,I}^\dagger g_{k,P}) | n \rangle \right|^2 \delta(E_m - E_n). \quad (3.74)$$

No primeiro caso,

$$\langle m | \gamma_k \alpha_q g_{k,P}^\dagger g_{q,I} | n \rangle = \gamma_k \alpha_q (\bar{n}_{(q,I)}) (1 - \bar{n}_{(k,P)}), \quad (3.75)$$

onde

$$E_m = E_n + \epsilon_{k,P} - \epsilon_{q,I}. \quad (3.76)$$

No segundo caso,

$$\langle m | \gamma_k \alpha_q g_{q,I}^\dagger g_{k,P} | n \rangle = \gamma_k \alpha_q (\bar{n}_{(k,P)}) (1 - \bar{n}_{(q,I)}), \quad (3.77)$$

com

$$E_m = E_n + \epsilon_{q,I} - \epsilon_{k,P}. \quad (3.78)$$

Obtemos, por fim,

$$\begin{aligned} \frac{G}{\frac{2e^2}{h}} &= \frac{\pi\Gamma}{\frac{k_B T}{D}} \frac{1}{Z} \sum_n e^{-\beta E_n} \sum_k \sum_q \gamma_k^2 \alpha_q^2 n(q, n_I) (1 - n(k, n_P)) \delta(\epsilon_{k,P} - \epsilon_{q,I}); \\ &+ \frac{\pi\Gamma}{\frac{k_B T}{D}} \frac{1}{Z} \sum_n e^{-\beta E_n} \sum_k \sum_q \gamma_k^2 \alpha_q^2 n(k, n_P) (1 - n(q, n_I)) \delta(\epsilon_{q,I} - \epsilon_{k,P}). \end{aligned} \quad (3.79)$$

Agora, usando que as bandas par e ímpar são desacopladas, de modo que $|n\rangle = |n\rangle_{\text{odd}} \otimes |n\rangle_{\text{even}}$ e $E_n = E_{ne} + E_{no}$, de modo que seja possível escrever a função partição como uma produto da parte par e ímpar, $Z = Z_P Z_I$, podemos escrever

$$f(\epsilon_{k,P}) = \sum_{n_P} \frac{e^{-\beta E_{n_P}}}{Z_P} n(k, n_P) \quad (3.80)$$

e também escrever forma semelhante para $n(q, n_I)$, para obter

$$\begin{aligned} \frac{G}{\frac{2e^2}{h}} &= \frac{\pi\Gamma}{\frac{k_B T}{D}} \sum_k \sum_q \gamma_k^2 \alpha_q^2 (f(q,I)) (1 - f(k,P)) \delta(\epsilon_{k,P} - \epsilon_{q,I}), \\ &+ \frac{\pi\Gamma}{\frac{k_B T}{D}} \sum_k \sum_q \gamma_k^2 \alpha_q^2 (f(k,P)) (1 - f(q,I)) \delta(\epsilon_{q,I} - \epsilon_{k,P}). \end{aligned} \quad (3.81)$$

Também é possível fazer $\epsilon_{k,P} = \epsilon_{q,I}$, já que os dois termos tem que ser iguais para a delta de Dirac ser diferente de zero na equação (3.79). Desse modo é possível reescrever a equação (3.79) da seguinte forma:

$$\frac{G}{\frac{2e^2}{h}} = 2 \frac{\pi\Gamma}{\frac{k_B T}{D}} \sum_k \sum_q \gamma_k^2 \alpha_q^2 (f(q,I)) (1 - f(q,I)) \delta(\epsilon_{k,P} - \epsilon_{q,I}). \quad (3.82)$$

Por fim, usando a definição da distribuição de Fermi-Dirac,

$$\frac{G}{\frac{2e^2}{h}} = 2 \frac{\pi\Gamma}{\frac{k_B T}{D}} \sum_k \sum_q \gamma_k^2 \alpha_q^2 \frac{e^{\beta\epsilon_{q,I}}}{(e^{\beta\epsilon_{q,I}} + 1)^2} \delta(\epsilon_{k,P} - \epsilon_{q,I}). \quad (3.83)$$

Como já foi discutido, as bandas par e ímpar tem seus próprios z 's, de modo que é possível deixar essa dependência clara na equação (3.79) e fazer análogo à equação (3.69):

$$\frac{G(z_P)}{\frac{2e^2}{h}} = 2 \frac{\pi\Gamma}{\frac{k_B T}{D}} \int dz_I \sum_k \sum_q \gamma_k^2(z_P) \alpha_q^2(z_I) \frac{e^{\beta\epsilon_{q,I}(z_I)}}{(e^{\beta\epsilon_{q,I}(z_I)} + 1)^2} \delta(\epsilon_{k,P}(z_P) - \epsilon_{q,I}(z_I)). \quad (3.84)$$

Resolvendo a integral da equação (3.81), aplicando o delta de Dirac, temos:

$$\frac{G(z_P)}{\frac{2e^2}{h}} = 2 \frac{\pi\Gamma}{\frac{k_B T}{D}} \sum_{k,q}^* \gamma_k^2(z_P) \frac{\alpha_q^2(z_I^*)}{\left| \frac{d\epsilon_{q,I}}{dz_I}(z_I^*) \right|} \frac{e^{\beta\epsilon_{q,I}(z_I^*)}}{(e^{\beta\epsilon_{q,I}(z_I^*)} + 1)^2}. \quad (3.85)$$

Da mesma forma que já foi comentado, z_I^* é o z_I onde as energias $\epsilon_{k,P}(z_P)$ e $\epsilon_{q,I}(z_I)$ se cruzam. O asterisco na somatória da equação (3.82) indica que apenas os pares k e q com energias que se cruzam estão sendo contabilizados para a somatória.

Vale ressaltar que no final, a condutância fica dependendo do parâmetro z_P , pois durante todos os cálculos para tratar do delta de Dirac, o parâmetro z_P foi considerado fixo. Porém, posteriormente, quando forem gerados gráficos para a condutância, será realizada uma média da condutância utilizando 4 valores de z_P , com o intuito de anular oscilações que aparecem naturalmente no método.

3.6 Problema do truncamento

Ao analisar o caso de duas bandas, um dos problemas que se mostra aparente é o truncamento dos estados. Como o caso de duas bandas apresenta um número muito maior de estados para serem calculados do que o caso de uma banda, os cortes que geram curvas sem anomalias no caso de uma banda apresenta problemas no caso de duas bandas, que pode ser visto nos gráficos da seção 2.4.

Como nem sempre é possível simplesmente aumentar o corte para utilizar um número maior de estados nos cálculos, por razão de limitação de poder de processamento, essa seção irá propor utilizar técnicas perturbativas para amenizar o problema. Técnicas semelhantes já foram usadas no passado^[9], quando os computadores usados eram muito inferiores que os computadores pessoais de hoje, vale observar também que usar o parâmetro z é um método não perturbativo, que tem grande sucesso em eliminar alguns problemas de usar valores de Λ grande, onde no passado eram obrigados a usar valores mais próximos de 1 para evitar oscilações nas curvas.

Para testar o método perturbativo foi criado um programa que resolve a hamiltoniana do problema na sua forma mais simples, não contendo nenhum termo de vários corpos, no caso os termos U_d e U_0 . O objetivo aqui é ter grupos de autovalores e autovetores para aplicar as perturbações, mas que possam ser calculados de forma rápida para testar o método. A hamiltoniana usada terá a seguinte forma:

$$H = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{2} (1 + \Lambda^{-1}) \Lambda^{\frac{-n}{2}} \xi_n (f_{n\sigma}^\dagger f_{n+1\sigma} + f_{n+1\sigma}^\dagger f_{n\sigma}) \quad (3.86)$$

Para realizar a perturbação a hamiltoniana será dividida em duas partes, como o programa só pode usar um número finito de etapas, a equação (3.86) será reescrita como:

$$H = H^{(N,I)} + \Delta H + H^{(N,F)} \quad (3.87)$$

$$\begin{aligned} H^{(N,I)} &= \sum_{n=0}^{N-1} \frac{1}{2} (1 + \Lambda^{-1}) \Lambda^{\frac{-n}{2}} \xi_n (f_{n\sigma}^\dagger f_{n+1\sigma} + f_{n+1\sigma}^\dagger f_{n\sigma}); \\ \Delta H &= \frac{1}{2} (1 + \Lambda^{-1}) \Lambda^{\frac{-N}{2}} \xi_N (f_{N\sigma}^\dagger f_{N+1\sigma} + f_{N+1\sigma}^\dagger f_{N\sigma}); \\ H^{(N,F)} &= \sum_{n=N+1}^{\infty} \frac{1}{2} (1 + \Lambda^{-1}) \Lambda^{\frac{-n}{2}} \xi_n (f_{n\sigma}^\dagger f_{n+1\sigma} + f_{n+1\sigma}^\dagger f_{n\sigma}). \end{aligned} \quad (3.88)$$

Neste caso, N será a etapa máxima que o programa realizará os cálculos, de modo que o programa usará $H^{(N,I)}$ para as operações, que contêm operadores até N . O objetivo é conseguir os efeitos de $H^{(N,F)}$ (que é formado pelas etapas restantes) por meio de uma perturbação ΔH que faz a ligação entre $H^{(N,I)}$ e $H^{(N,F)}$.

A perturbação será feita de forma que o programa diagonaliza tanto $H^{(N,I)}$ quanto $H^{(N,F)}$ e usa a ΔH para realizar a perturbação nos autovalores e autovetores de $H^{(N,I)}$. Diferente do que está na equação (3.88), $H^{(N,F)}$ não tem infinitas etapas, o que seria o caso ideal, mas as etapas são cortadas em um número $N + N_f$, onde a princípio N_f pode ser qualquer valor inteiro positivo.

Em um primeiro momento fica claro porque a perturbação melhora os resultados, já que na prática ele está pegando mais estados para realizar as contas, já que no lugar de pegar a etapa N , acaba realizando cálculos para a etapa $N + N_f$. Porém a análise foi feita justamente para determinar qual valor de N_f é grande o suficiente para melhorar os efeitos do truncamento, que podem ser vistos no gráfico da figura 25.

Trabalhamos com as perturbações de ordem mais baixa possível, que já foram suficientes para melhorar o efeito do truncamento nas curvas de condutância: de segunda ordem nas energias e de primeira ordem nos auto-vetores. Os cálculos podem ser vistos no apêndice A. Um fato importante que vale a pena ser ressaltado é que foi necessário fazer a correção perturbativa também na derivada encontrada na equação (3.85), além de ser

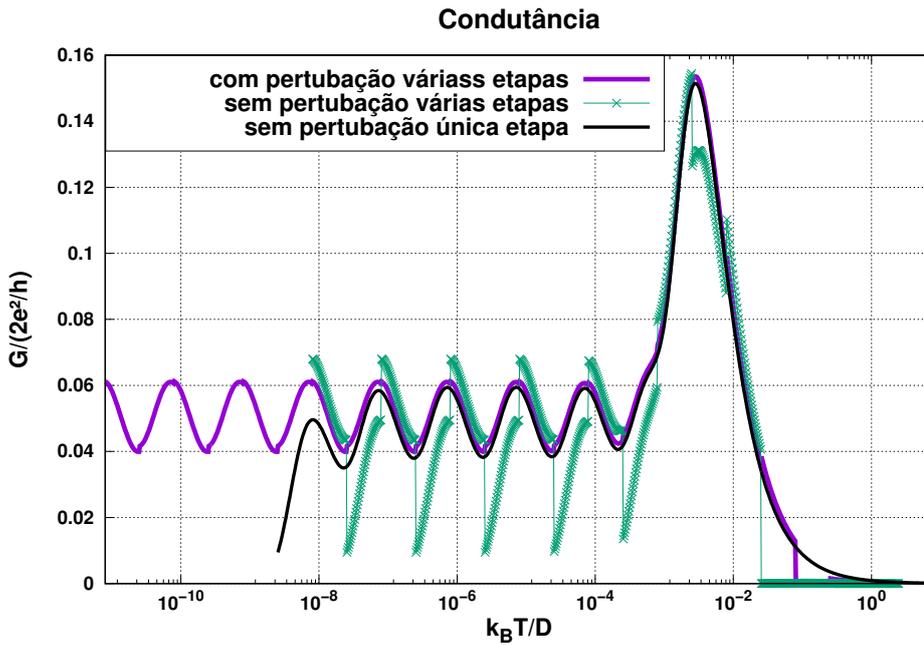


Figura 25 — Gráfico da condutância em função da temperatura, os dados foram gerados em um programa sem a interação de vários corpos (sem os termos U_d e U_0). Na curva preta não é aplicada a perturbação, mas são utilizados para os cálculos todos os autovalores e autovetores como se fosse uma única etapa, o efeito do truncamento só é visto nas últimas energias de temperatura muito baixa. A curva verde com pontos separa os autovalores e autovetores nas faixas das etapas, de modo semelhante ao que ocorre com o programa de NRG de muitos corpos, e o efeito de truncamento aparece em todas as etapas. A curva roxa simula o efeito do truncamento em todas as etapas e realiza a perturbação para corrigir.

usada teoria de perturbação para estados degenerados quando necessário. O motivo para isto é que quando N é par, temos um número ímpar de operadores, e como as energias são simétricas com valores que mudam apenas o sinal, com um número ímpar de energias aparecerá uma energia com valor zero, que é degenerada com o estado de energia zero, que aparece na cadeia restante ($H_{N,F}$), se esta também tiver um número ímpar de estados.

Realizados os cálculos perturbativos e comprovado que o efeito do truncamento é amenizado pelo procedimento, o próximo passo foi determinar o valor mínimo de N_f , que pode ser usado para obter bons resultados na perturbação, já que N_f muito grande tornaria o cálculo ainda mais custoso computacionalmente. Após realizar os testes foi determinado que mesmo com $N_f = 1$ já é possível obter melhoras significativas no gráfico, o que mostra que o método perturbativo pode ser uma solução viável para o problema de truncamento que aparece no problema de duas bandas, como pode ser visto na gráfico da figura 26.

Vale ressaltar que o procedimento de perturbação foi feito apenas num programa, onde não havia os termos U_d e U_0 , não sendo um problema de muitos corpos que necessita a utilização do Grupo de Renormalização Numérico para ser resolvido. A aplicação do método perturbativo em um programa, que realiza todos os cálculos do GRN em duas

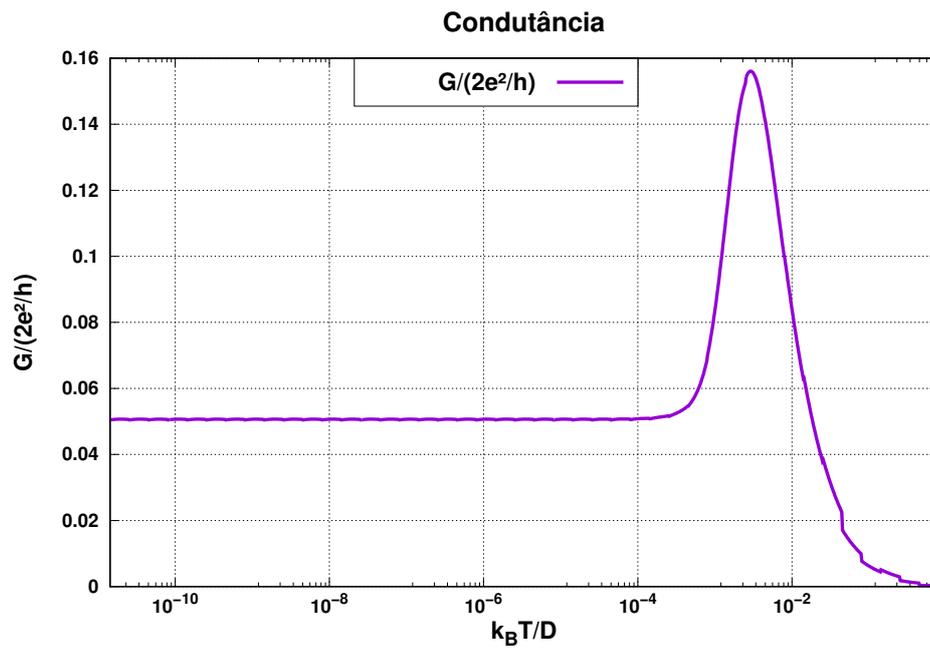


Figura 26 — Gráfico da condutância em função da temperatura. Os dados foram gerados em um programa sem a interação de vários corpos (sem os termos U_d e U_0). O programa separa os autovalores e autovetores nas faixas das etapas, de modo semelhante ao que ocorre com o programa de NRG de muitos corpos. Foi aplicado a correção perturbativa e realizada a média no parâmetro z para gerar a curva que diminui o efeito do truncamento.

bandas não é tão simples como no caso estudado aqui, ainda mais quando as bandas de energias estão acopladas com o termo U_0 . De modo que fica em aberto o problema para fazer uma perturbação similar à discutida aqui no problema de duas bandas.

Conclusão

Neste trabalho foi feito um estudo do modelo de Anderson para um ponto quântico entre duas bandas de elétrons através da técnica do Grupo de Renormalização Numérico, com a adição de uma interação coulombiana aos orbitais que se acoplam diretamente ao ponto quântico em ambos os contatos metálicos.

No decorrer do trabalho foi feita uma revisão bibliográfica do trabalho de Krishnamurthy, Wilkins e Wilson^[9], que tratou originalmente o Hamiltoniano de Anderson para o problema de uma impureza magnética através do Grupo de Renormalização Numérico. Os cálculos foram adaptados para o problema onde a impureza magnética é substituída pelo ponto quântico e consideradas duas bandas de elétrons no lugar de uma.

Feita a modificação na hamiltoniana, foi estudado o método iterativo característico do grupo de renormalização numérico. Foram calculados analiticamente todos os elementos de matriz necessários para o cálculo da iteração inicial (etapa 0) que, por sua vez, alimenta o método iterativo numérico, permitindo assim a inclusão do termo de repulsão coulombiana U_0 . As matrizes da etapa 0 podem ser vistas no apêndice B.

A segunda parte do trabalho foi dedicada inicialmente ao cálculo da contribuição do ponto quântico às propriedades termodinâmicas para em seguida discutirmos o cálculo da condutância. Com o intuito desse trabalho era o de discutir o efeito da repulsão coulombiana nos orbitais f_0 , optamos por fixar os parâmetros relacionados ao ponto quântico, escolhendo-os de modo a estar no regime Kondo do modelo de Anderson.

Assim, pudemos entender o comportamento da temperatura Kondo em função dos parâmetros ϵ_0 e U_0 no caso de uma banda de condução. Para o caso de duas bandas acopladas, que é o modelo que de fato elaboramos para o sistema de interesse, pudemos observar que a contribuição da impureza muda em relação à situação de uma banda, porém, as curvas universais são as mesmas. Não conseguimos elaborar uma análise quantitativa do comportamento da temperatura Kondo, como foi possível fazer no caso de uma única banda.

Constatamos que os comportamentos de T_K para duas bandas e uma banda são diferentes, sendo que com duas bandas, a temperatura Kondo apresenta uma dependência mais acentuada com os parâmetros ϵ_0 e U_0 . Um aspecto interessante de ser observado é a análise feita no caso de uma banda com repulsão coulombiana no orbital f_0 , onde o termo quártico de interação foi decomposto num termo de espalhamento mais um operador irrelevante,

$$U_0 f_{0\uparrow}^\dagger f_{0\uparrow} f_{0\downarrow}^\dagger f_{0\downarrow} = \frac{U_0}{2} \left[(f_{0\uparrow}^\dagger f_{0\uparrow} + f_{0\downarrow}^\dagger f_{0\downarrow} - 1) + (f_{0\uparrow}^\dagger f_{0\uparrow} + f_{0\downarrow}^\dagger f_{0\downarrow} - 1)^2 \right]. \quad (3.89)$$

Essa análise sugere que, como primeira aproximação, podemos substituir o termo de interação pelo termo de espalhamento

$$\frac{U_0}{2} (f_{0\uparrow}^\dagger f_{0\uparrow} + f_{0\downarrow}^\dagger f_{0\downarrow}).$$

No caso de duas bandas, uma à esquerda e outra à direita do ponto quântico, se fizermos a substituição acima nessas bandas e só depois considerarmos as transformações para os estados pares e ímpares, ficaremos com banda ímpar desacoplada. Isso sugere compararmos os gráficos de propriedades termodinâmicas para a) duas bandas, com $U_0 > 0$, mas sem espalhamento, e b) uma banda, com $\epsilon_0 = U_0/2$, mas sem repulsão no f_0 .

Com relação ao problema de calcular a condutância em regime de resposta linear, nos deparamos com a complicação do acoplamento entre as bandas par e ímpar devido ao termo adicional de repulsão coulombiana. Essa complicação levou à construção de uma nova equação para a condutância, já que em geral, considera-se uma situação em que o desacoplamento das bandas pode ser feito.

A nova formulação requereu um tratamento apropriado para lidar com a delta de Dirac, que foi realizado via integração no parâmetro z_I de discretização logarítmica da banda ímpar. Essa formulação revelou-se bastante complexa de ser implementada no tempo do mestrado e nos contentamos em testá-la no caso não-interagente. Assim, utilizamos este caso para simular uma situação de energia de corte pequena, onde constatamos que a teoria de perturbação de ordem mais baixa e cadeia restante com apenas um sítio são suficientes para uma correção satisfatória.

Em conexão com a observação feita no parágrafo anterior, podemos esperar que a condutância do problema de duas bandas acopladas seja parecida com a condutância do problema de bandas que se desacoplam, tendo um termo de espalhamento da forma $U_0/2 (f_{0\uparrow}^\dagger f_{0\uparrow} + f_{0\downarrow}^\dagger f_{0\downarrow})$ na banda par. Mas como não pudemos implementar o cálculo do problema com bandas acopladas, isto não pôde ser verificado.

Por último vale ressaltar que a dificuldade que surgiu nesse problema para o cálculo de condutância também deveria aparecer se tivéssemos um ponto quântico mais complexo, envolvendo mais de um nível de energia. Isto pode ser observado se consideramos o conjunto de orbitais $f_{0,L}, c_d, f_{0,R}$ como ponto quântico. Dessa maneira, a formulação proposta neste trabalho pode ser útil em outras situações.

Referências

- 1 WOOD, V.; BULOVIĆ, V. Colloidal quantum dot light-emitting devices. *Nano reviews*, Taylor & Francis, v. 1, n. 1, p. 5202, 2010. Citado na página 15.
- 2 RASTELLI, A. et al. Hierarchical self-assembly of gaas/algaas quantum dots. *Physical review letters*, APS, v. 92, n. 16, p. 166104, 2004. Citado na página 15.
- 3 GOLDHABER-GORDON, D. et al. Kondo effect in a single-electron transistor. *Nature*, Nature Publishing Group, v. 391, n. 6663, p. 156, 1998. Citado 3 vezes nas páginas 16, 19 e 26.
- 4 KORKUSINSKI, M. et al. Electron spin based qubits. *Physics in Canada*, v. 63, p. 229, 01 2007. Citado na página 17.
- 5 NG, T.; LEE, P. A. On-site coulomb repulsion and resonant tunneling. *Physical Review Letters*, APS, v. 61, n. 15, p. 1768, 1988. Citado 2 vezes nas páginas 17 e 19.
- 6 KONDO, J. Resistance minimum in dilute magnetic alloys. *Progress of theoretical physics*, Oxford University Press, v. 32, n. 1, p. 37–49, 1964. Citado 4 vezes nas páginas 17, 25, 29 e 56.
- 7 ANDERSON, P. W. Localized magnetic states in metals. *Physical Review*, APS, v. 124, n. 1, p. 41, 1961. Citado 4 vezes nas páginas 18, 19, 25 e 26.
- 8 SCHRIEFFER, J.; WOLF, P. A. Relation between the anderson and kondo hamiltonians. *Physical Review*, v. 149, p. 491, 1961. Citado 3 vezes nas páginas 19, 25 e 62.
- 9 KRISHNA-MURTHY, H.; WILKINS, J.; WILSON, K. Renormalization-group approach to the anderson model of dilute magnetic alloys. i. static properties for the symmetric case. *Physical Review B*, APS, v. 21, n. 3, p. 1003, 1980. Citado 18 vezes nas páginas 19, 21, 25, 27, 28, 29, 30, 39, 49, 51, 53, 57, 58, 59, 60, 62, 86 e 91.
- 10 LEE, P. A. Few electron nanostructures: a laboratory for studying strongly interacting systems. *Physica B*, v. 189, p. 1, 1993. Citado na página 19.
- 11 KOUWENHOVEN, L.; GLAZMAN, L. Revival of the kondo effect. *Physics World*, v. 14, n. 1, p. 33, 2001. Citado na página 19.
- 12 CAMPO, V. L.; OLIVEIRA, L. N. Renormalization-group approach to the problem of conduction through a nanostructure. *Physical Review B*, APS, v. 68, n. 3, p. 035337, 2003. Citado 3 vezes nas páginas 19, 64 e 71.
- 13 YOSHIDA, M.; SERIDONIO, A. C.; OLIVEIRA, L. N. d. Universal zero-bias conductance for the single-electron transistor. *Physical Review B*, APS, v. 80, n. 23, p. 235317, 2009. Citado 5 vezes nas páginas 19, 26, 61, 64 e 71.
- 14 MAHAVAN, V. et al. Tunneling into a single magnetic atom: Spectroscopic evidence of the kondo resonance. *Science*, v. 280, p. 567, 1998. Citado na página 19.

- 15 SATO, M. et al. Observation of the fano-kondo antiresonance in a quantum wire with a side-coupled quantum dot. *Physical Review Letters*, v. 95, p. 066801, 2005. Citado na página 19.
- 16 YU, L. et al. Kondo resonances and anomalous gate dependence in the electrical conductivity of single-molecule transistors. *Physical Review Letters*, v. 95, p. 256803, 2005. Citado na página 19.
- 17 PARKS, J. et al. Tuning the kondo effect with a mechanically controllable break junction. *Physical Review Letters*, v. 99, p. 026601, 2007. Citado na página 19.
- 18 GROBIS, M. et al. Universal scaling in nonequilibrium transport through a single channel kondo dot. *Physical Review Letters*, v. 100, p. 246601, 2008. Citado 2 vezes nas páginas 19 e 20.
- 19 OLIVEIRA, L. N. Effect of partial screening upon the conductance through nanostructured devices. *Journal of superconductivity and novel magnetism*, Springer, v. 26, n. 6, p. 2189–2192, 2013. Citado 3 vezes nas páginas 19, 20 e 64.
- 20 WILSON, K. G. The renormalization group: Critical phenomena and the kondo problem. *Reviews of modern physics*, APS, v. 47, n. 4, p. 773, 1975. Citado 5 vezes nas páginas 25, 32, 52, 56 e 57.
- 21 BULLA, R.; COSTI, T. A.; PRUSCHKE, T. Numerical renormalization group method for quantum impurity systems. *Reviews of Modern Physics*, APS, v. 80, n. 2, p. 395, 2008. Citado na página 26.
- 22 WILSON, K. G.; KOGUT, J. The renormalization group and the ϵ expansion. *Physics Reports*, Elsevier, v. 12, n. 2, p. 75–199, 1974. Citado 2 vezes nas páginas 29 e 32.
- 23 OLIVEIRA, W. C.; OLIVEIRA, L. N. Generalized numerical renormalization-group method to calculate the thermodynamical properties of impurities in metals. *Physical Review B*, APS, v. 49, n. 17, p. 11986, 1994. Citado 3 vezes nas páginas 32, 45 e 46.
- 24 CAMPO, V. L.; OLIVEIRA, L. N. Alternative discretization in the numerical renormalization-group method. *Physical Review B*, APS, v. 72, n. 10, p. 104432, 2005. Citado 2 vezes nas páginas 33 e 34.
- 25 CAMPO, V. L.; OLIVEIRA, L. N. Thermodynamics for the two-impurity kondo model. *Physical Review B*, APS, v. 70, n. 15, p. 153401, 2004. Citado na página 34.
- 26 ANDERSON, E. et al. *LAPACK Users' Guide*. Third. Philadelphia, PA: Society for Industrial and Applied Mathematics, 1999. ISBN 0-89871-447-8 (paperback). Citado 2 vezes nas páginas 39 e 64.
- 27 MESSIAH, A. *Quantum Mechanics*. [S.l.]: Dover Publications, 1999. Citado na página 40.
- 28 CAMPO, V. L. *O grupo de renormalização numérico e o problema de duas impurezas*. Tese (Doutorado) — Universidade de São Paulo, 2004. Citado 2 vezes nas páginas 46 e 47.

Apêndices

APÊNDICE A – Cálculos da perturbação

Nesta parte do apêndice, serão melhor detalhados os cálculos feitos para realizar as perturbações discutidas na seção 3.6 deste trabalho.

A hamiltoniana utilizada é dada por:

$$H = \frac{\epsilon_d}{D} c_{d\sigma}^\dagger c_{d\sigma} + \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{2} (1 + \Lambda^{-1}) \Lambda^{\frac{-n}{2}} \xi_n (f_{n\sigma}^\dagger f_{n+1\sigma} + f_{n+1\sigma}^\dagger f_{n\sigma}), \quad (\text{A.1})$$

que será dividida como:

$$H = H^{(N,I)} + \Delta H + H^{(N,F)}, \quad (\text{A.2})$$

para realizar a perturbação. Cada termo é dado por:

$$H^{(N,I)} = \sum_{n=0}^{N-1} \frac{1}{2} (1 + \Lambda^{-1}) \Lambda^{\frac{-n}{2}} \xi_n (f_{n\sigma}^\dagger f_{n+1\sigma} + f_{n+1\sigma}^\dagger f_{n\sigma}), \quad (\text{A.3})$$

$$\Delta H = \frac{1}{2} (1 + \Lambda^{-1}) \Lambda^{\frac{-N}{2}} \xi_N (f_{N\sigma}^\dagger f_{N+1\sigma} + f_{N+1\sigma}^\dagger f_{N\sigma}), \quad (\text{A.4})$$

e

$$H^{(N,F)} = \sum_{n=N+1}^{\infty} \frac{1}{2} (1 + \Lambda^{-1}) \Lambda^{\frac{-n}{2}} \xi_n (f_{n\sigma}^\dagger f_{n+1\sigma} + f_{n+1\sigma}^\dagger f_{n\sigma}). \quad (\text{A.5})$$

O termo ΔH é a perturbação que será usada. Serão corrigidos os autovalores e autovetores:

$$E_n = E_n^0 + E_n^1 + E_n^2 + \dots \quad (\text{A.6})$$

$$|\psi\rangle_n = |\psi_n^0\rangle + |\psi_n^1\rangle + |\psi_n^2\rangle + \dots \quad (\text{A.7})$$

onde E_n^0 e $|\psi_n^0\rangle$ são os autovalores e autovetores de $H^0 = H^{(N,I)} + H^{(N,F)}$, e os termos E_n^j e $|\psi_n^j\rangle$ são correções em ordem j .

Será também usada a nomenclatura e_n e $|q_n\rangle$ para os autovalores e autovetores de $H^{(N,I)}$, além de ϵ_k e $|q'_k\rangle$ para os autovalores e autovetores de $H^{(N,F)}$.

Neste trabalho será feita a perturbação até segunda ordem para as energias e até primeira ordem para os autovetores. Para o caso das energias, a perturbação de primeira ordem é dada por $E_n^1 = \langle \psi_n^0 | \Delta H | \psi_n^0 \rangle$. Porém, como ΔH é dado pela equação (A.4) temos que os autovetores de $H^{(N,I)}$ não possuem projeções nos estados de $H^{(N,F)}$ e vice-versa, de modo que

$$\langle f_N | q'_k \rangle = 0 \quad (\text{A.8})$$

e

$$\langle f_{N+1} | q_n \rangle = 0, \quad (\text{A.9})$$

fazendo com que o termo de primeira ordem da perturbação das energias seja nulo, $E_n^1 = 0$.

Para o caso do termo de primeira ordem para a perturbação dos autovetores será usado a definição seguinte

$$|\psi_n^1\rangle = \sum_{k \neq n} |\psi_k^0\rangle \frac{\langle \psi_k^0 | \Delta H | \psi_n^0 \rangle}{E_n^0 - E_k^0}. \quad (\text{A.10})$$

Utilizando as equações (A.8) e (A.9), além da definição de ΔH , é possível reescrever a equação acima da seguinte forma:

$$|\psi_n^1\rangle = \sum_k |q'_k\rangle \frac{\langle q'_k | f_{N+1}^\dagger f_N | q_n \rangle}{e_n - \epsilon_k} \frac{1}{2} (1 + \Lambda^{-1}) \Lambda^{-\frac{N}{2}} \xi_N, \quad (\text{A.11})$$

onde foi usado que os índices k de $|q'_k\rangle$ são referentes apenas aos índices dos operadores de $H^{(N,F)}$, k vai de $N + 1$ até ∞ .

Para o caso da perturbação de segunda ordem da energia será usada a seguinte formula:

$$E_n^2 = \sum_{k \neq n} \frac{|\langle \psi_k^0 | \Delta H | \psi_n^0 \rangle|^2}{E_n^0 - E_k^0}. \quad (\text{A.12})$$

Utilizando as equações (A.8) e (A.9), além da definição de ΔH , é possível reescrever a equação acima da seguinte forma:

$$E_n^2 = \sum_k \langle q_n | f_N^\dagger f_{N+1} | q'_k \rangle \langle q'_k | f_{N+1}^\dagger f_N | q_n \rangle \frac{(\frac{1}{2}(1 + \Lambda^{-1}) \Lambda^{-\frac{N}{2}} \xi_N)^2}{e_n - \epsilon_k}. \quad (\text{A.13})$$

Para terminar os cálculos só resta calcular o termo $\langle q_n | f_N^\dagger f_{N+1} | q'_k \rangle$, usando:

$$|q_n\rangle = |c_d\rangle \langle c_d | q_n \rangle + \sum_{m=0}^N |f_m\rangle \langle f_m | q_n \rangle, \quad (\text{A.14})$$

$$|q'_k\rangle = \sum_{m=N+1}^{\infty} |f_m\rangle \langle f_m | q'_k \rangle. \quad (\text{A.15})$$

É possível usar as equações acima para mostrar:

$$\langle q_n | f_N^\dagger f_{N+1} | q'_k \rangle = \langle f_N | q_n \rangle \langle f_{N+1} | q'_k \rangle. \quad (\text{A.16})$$

APÊNDICE B – Tabelas

Tabela 2 – Matrizes dos subespaços ímpares e seus vetores da base

Subespaço	vetores	matrizes
$(-2, \frac{1}{2})$	$f_{I0\uparrow}^\dagger \emptyset\rangle$	0
$(-1, 0)$	$\frac{1}{\sqrt{2}}(f_{P0\downarrow}^\dagger f_{I0\uparrow}^\dagger - f_{P0\uparrow}^\dagger f_{I0\downarrow}^\dagger) \emptyset\rangle$ $\frac{1}{\sqrt{2}}(f_{I0\downarrow}^\dagger c_{d\uparrow}^\dagger - f_{I0\uparrow}^\dagger c_{d\downarrow}^\dagger) \emptyset\rangle$	$\begin{pmatrix} \tilde{U}_0 & \sqrt{\tilde{\Gamma}} \\ \sqrt{\tilde{\Gamma}} & \tilde{\epsilon}_d \end{pmatrix}$
$(-1, 1)$	$f_{I0\uparrow}^\dagger c_{d\uparrow}^\dagger \emptyset\rangle$ $f_{P0\uparrow}^\dagger f_{I0\uparrow}^\dagger \emptyset\rangle$	$\begin{pmatrix} \tilde{\epsilon}_d & -\sqrt{\tilde{\Gamma}} \\ -\sqrt{\tilde{\Gamma}} & 0 \end{pmatrix}$
$(0, \frac{1}{2})$	$\left[-\frac{1}{\sqrt{6}} f_{P0\uparrow}^\dagger (f_{I0\uparrow}^\dagger c_{d\downarrow}^\dagger + (f_{I0\downarrow}^\dagger c_{d\uparrow}^\dagger) \right. \\ \left. + \sqrt{\frac{2}{3}} f_{P0\downarrow}^\dagger f_{I0\uparrow}^\dagger c_{d\uparrow}^\dagger \right] \emptyset\rangle$ $f_{I0\uparrow}^\dagger c_{d\uparrow}^\dagger c_{d\downarrow}^\dagger \emptyset\rangle$ $f_{P0\uparrow}^\dagger f_{P0\downarrow}^\dagger f_{I0\uparrow}^\dagger \emptyset\rangle$ $\frac{1}{\sqrt{2}}(f_{P0\uparrow}^\dagger f_{I0\downarrow}^\dagger c_{d\uparrow}^\dagger - f_{P0\uparrow}^\dagger f_{I0\uparrow}^\dagger c_{d\downarrow}^\dagger) \emptyset\rangle$	$\begin{pmatrix} \tilde{\epsilon}_d + \frac{3\tilde{U}_0}{4} & \sqrt{\frac{3\tilde{\Gamma}}{2}} & \sqrt{\frac{3\tilde{\Gamma}}{2}} & -\frac{\sqrt{3}\tilde{U}_0}{4} \\ \sqrt{\frac{3\tilde{\Gamma}}{2}} & 2\tilde{\epsilon}_d + \tilde{U}_d & 0 & \sqrt{\frac{\tilde{\Gamma}}{2}} \\ \sqrt{\frac{3\tilde{\Gamma}}{2}} & 0 & \tilde{U}_0 & \sqrt{\frac{\tilde{\Gamma}}{2}} \\ -\frac{\sqrt{3}\tilde{U}_0}{4} & \sqrt{\frac{\tilde{\Gamma}}{2}} & \sqrt{\frac{\tilde{\Gamma}}{2}} & \tilde{\epsilon}_d + \frac{\tilde{U}_0}{4} \end{pmatrix}$
$(0, \frac{3}{2})$	$f_{P0\uparrow}^\dagger f_{I0\downarrow}^\dagger c_{d\uparrow}^\dagger \emptyset\rangle$	$\tilde{\epsilon}_d$
$(1, 0)$	$-\frac{1}{\sqrt{2}}(f_{P0\uparrow}^\dagger f_{I0\downarrow}^\dagger - f_{P0\downarrow}^\dagger f_{I0\uparrow}^\dagger) c_{d\uparrow}^\dagger c_{d\downarrow}^\dagger \emptyset\rangle$ $-\frac{1}{\sqrt{2}} f_{P0\uparrow}^\dagger f_{P0\downarrow}^\dagger (f_{I0\uparrow}^\dagger c_{d\downarrow}^\dagger - f_{I0\downarrow}^\dagger c_{d\uparrow}^\dagger) \emptyset\rangle$	$\begin{pmatrix} 2\tilde{\epsilon}_d + \tilde{U}_d + \tilde{U}_0 & -\sqrt{\tilde{\Gamma}} \\ -\sqrt{\tilde{\Gamma}} & 2\tilde{\epsilon}_d + \tilde{U}_0 \end{pmatrix}$
$(1, 1)$	$f_{P0\uparrow}^\dagger f_{P0\downarrow}^\dagger f_{I0\uparrow}^\dagger c_{d\uparrow}^\dagger \emptyset\rangle$ $f_{P0\uparrow}^\dagger f_{I0\uparrow}^\dagger c_{d\uparrow}^\dagger c_{d\downarrow}^\dagger \emptyset\rangle$	$\begin{pmatrix} 2\tilde{\epsilon}_d + \tilde{U}_0 & \sqrt{\tilde{\Gamma}} \\ \sqrt{\tilde{\Gamma}} & 2\tilde{\epsilon}_d + \tilde{U}_d \end{pmatrix}$
$(2, \frac{1}{2})$	$f_{P0\uparrow}^\dagger f_{P0\downarrow}^\dagger f_{I0\uparrow}^\dagger c_{d\uparrow}^\dagger c_{d\downarrow}^\dagger \emptyset\rangle$	$2\tilde{\epsilon}_d + \tilde{U}_d + \tilde{U}_0$

Tabela 3 – Matrizes dos subespaços Pares e seus vetores da base

Subespaço	Vetores	Matrizes
$(-3, 0)$	$ \emptyset\rangle$	0
$(-2, \frac{1}{2})$	$c_{d\uparrow}^\dagger \emptyset\rangle$ $f_{P0\uparrow}^\dagger \emptyset\rangle$	$\begin{pmatrix} \tilde{\epsilon}_d & \sqrt{\tilde{\Gamma}} \\ \sqrt{\tilde{\Gamma}} & 0 \end{pmatrix}$
$(-1, 0)$	$c_{d\uparrow}^\dagger c_{d\downarrow}^\dagger \emptyset\rangle$ $\frac{1}{\sqrt{2}}(f_{P0\downarrow}^\dagger c_{d\uparrow}^\dagger - f_{P0\uparrow}^\dagger c_{d\downarrow}^\dagger) \emptyset\rangle$ $f_{P0\uparrow}^\dagger f_{P0\downarrow}^\dagger \emptyset\rangle$ $f_{I0\uparrow}^\dagger f_{I0\downarrow}^\dagger \emptyset\rangle$	$\begin{pmatrix} 2\tilde{\epsilon}_d + \tilde{U}_d & -\sqrt{2\tilde{\Gamma}} & 0 & 0 \\ -\sqrt{2\tilde{\Gamma}} & \tilde{\epsilon}_d & -\sqrt{2\tilde{\Gamma}} & 0 \\ 0 & -\sqrt{2\tilde{\Gamma}} & \frac{\tilde{U}_0}{2} & \frac{\tilde{U}_0}{2} \\ 0 & 0 & \frac{\tilde{U}_0}{2} & \frac{\tilde{U}_0}{2} \end{pmatrix}$
$(-1, 1)$	$f_{P0\uparrow}^\dagger c_{d\downarrow}^\dagger \emptyset\rangle$	$\tilde{\epsilon}_d$
$(0, \frac{1}{2})$	$f_{I0\uparrow}^\dagger f_{I0\downarrow}^\dagger c_{d\uparrow}^\dagger \emptyset\rangle$ $f_{P0\uparrow}^\dagger c_{d\uparrow}^\dagger c_{d\downarrow}^\dagger \emptyset\rangle$ $f_{P0\uparrow}^\dagger f_{P0\downarrow}^\dagger c_{d\uparrow}^\dagger \emptyset\rangle$ $f_{P0\uparrow}^\dagger f_{I0\uparrow}^\dagger f_{I0\downarrow}^\dagger \emptyset\rangle$	$\begin{pmatrix} \tilde{\epsilon}_d + \frac{\tilde{U}_0}{2} & 0 & \frac{\tilde{U}_0}{2} & \sqrt{\tilde{\Gamma}} \\ 0 & 2\tilde{\epsilon}_d + \tilde{U}_d & -\sqrt{\tilde{\Gamma}} & 0 \\ \frac{\tilde{U}_0}{2} & -\sqrt{\tilde{\Gamma}} & \tilde{\epsilon}_d & 0 \\ \sqrt{\tilde{\Gamma}} & 0 & 0 & \tilde{U}_0 \end{pmatrix}$
$(1, 0)$	$f_{I0\uparrow}^\dagger f_{I0\downarrow}^\dagger c_{d\uparrow}^\dagger c_{d\downarrow}^\dagger \emptyset\rangle$ $f_{P0\uparrow}^\dagger f_{P0\downarrow}^\dagger f_{I0\uparrow}^\dagger f_{I0\downarrow}^\dagger \emptyset\rangle$ $f_{P0\uparrow}^\dagger f_{P0\downarrow}^\dagger c_{d\uparrow}^\dagger c_{d\downarrow}^\dagger \emptyset\rangle$ $\frac{1}{\sqrt{2}}(f_{P0\uparrow}^\dagger f_{I0\uparrow}^\dagger f_{I0\downarrow}^\dagger c_{d\uparrow}^\dagger - f_{P0\downarrow}^\dagger f_{I0\uparrow}^\dagger f_{I0\downarrow}^\dagger c_{d\uparrow}^\dagger) \emptyset\rangle$	$\begin{pmatrix} 2\tilde{\epsilon}_d + \tilde{U}_d + \frac{\tilde{U}_0}{2} & \frac{\tilde{U}_0}{2} & -\sqrt{2\tilde{\Gamma}} & 0 \\ \frac{\tilde{U}_0}{2} & 2\tilde{\epsilon}_d + \tilde{U}_d + \frac{\tilde{U}_0}{2} & 0 & 0 \\ -\sqrt{2\tilde{\Gamma}} & 0 & \tilde{\epsilon}_d + \tilde{U}_0 & -\sqrt{2\tilde{\Gamma}} \\ 0 & 0 & -\sqrt{2\tilde{\Gamma}} & 2\tilde{U}_0 \end{pmatrix}$
$(1, 1)$	$f_{P0\uparrow}^\dagger f_{I0\uparrow}^\dagger f_{I0\downarrow}^\dagger c_{d\uparrow}^\dagger \emptyset\rangle$	$\tilde{\epsilon}_d + \tilde{U}_0$
$(2, \frac{1}{2})$	$f_{P0\uparrow}^\dagger f_{I0\uparrow}^\dagger f_{I0\downarrow}^\dagger c_{d\uparrow}^\dagger c_{d\downarrow}^\dagger \emptyset\rangle$ $f_{P0\uparrow}^\dagger f_{P0\downarrow}^\dagger f_{I0\uparrow}^\dagger f_{I0\downarrow}^\dagger c_{d\uparrow}^\dagger \emptyset\rangle$	$\begin{pmatrix} 2\tilde{\epsilon}_d + \tilde{U}_d + \tilde{U}_0 & -\sqrt{2\tilde{\Gamma}} \\ -\sqrt{2\tilde{\Gamma}} & 2\tilde{\epsilon}_d + \tilde{U}_0 \end{pmatrix}$
$(3, 0)$	$f_{P0\uparrow}^\dagger f_{I0\uparrow}^\dagger f_{I0\downarrow}^\dagger c_{d\uparrow}^\dagger c_{d\downarrow}^\dagger \emptyset\rangle$	$2\tilde{\epsilon}_d + \tilde{U}_d + 2\tilde{U}_0$