



Marco Antonio Manya Suni

Efeito da interação spin-órbita nas propriedades físicas de um sistema Kondo

Dissertação de Mestrado

Dissertação apresentada como requisito parcial para obtenção do grau de Mestre pelo Programa de Pós-graduação em Física do Departamento de Física do Centro Técnico Científico da PUC-Rio.

Orientador: Prof. Enrique Victoriano Anda

Rio de Janeiro
Agosto de 2017



Marco Antonio Many Suni

**Efeito da interação spin-órbita
nas propriedades físicas de um sistema Kondo**

Dissertação apresentada como requisito parcial para obtenção do grau de Mestre pelo Programa de Pós-Graduação em Física do Departamento de Física do Centro Técnico Científico da PUC-Rio. Aprovada pela Comissão Examinadora abaixo assinada.

Prof. Enrique Victoriano Anda

Orientador

Departamento de Física – PUC-Rio

Prof. George Balster Martins

UFF

Prof. Marcos Sergio Figueira da Silva

UFF

Prof. Márcio da Silveira Carvalho

Coordenador Setorial do Centro

Técnico Científico – PUC-Rio

Rio de Janeiro, 22 de agosto de 2017.

Todos os direitos reservados. É proibida a reprodução total ou parcial do trabalho sem autorização da universidade, do autor e do orientador.

Marco Antonio Manya Suni

Possui graduação - bacharelado - em Física pela Universidad San Agustín (Arequipa-Peru-2015).

Ficha Catalográfica

Manya Suni, Marco Antonio

Efeito da interação spin-órbita nas propriedades físicas de um sistema Kondo / Marco Antonio Manya Suni; orientador: Enrique Victoriano Anda. – Rio de Janeiro: PUC-Rio, Departamento de Física, 2017.

v., 63 f: il. color. ; 30 cm

Dissertação (mestrado) - Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro, Departamento de Física.

Inclui bibliografia

Física1. Efeito Kondo; Temperatura Kondo; Interação Spin-Órbita; Modelo de impurezas de Anderson; Simetria $SU(2)$. I. Anda, Enrique Victoriano. II. Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro. Departamento de Física. III. Título.

CDD: 530

Agradecimentos

Agradeço em primeiro lugar, a meu orientador Enrique Victoriano Anda pela sua imensa paciência para me orientar, a pesar das minhas dificuldades e sobretudo na árdua tarefa da escrita. Eu me sinto afortunado por ter trabalhado com ele, porque aprendi muito, não somente no âmbito acadêmico mas também no âmbito profissional e pessoal, durante o meu mestrado.

Agradeço à Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro (PUC-Rio) por brindar a sua infraestrutura bastante acolhedora, especialmente ao coordenador da pós-graduação do Departamento de Física, o professor Hiroshi Nunokawa, ao seletor time de professores das diferentes disciplinas que cursei e aos funcionários da secretaria da pós-graduação e o departamento de Física.

Agradeço também: as agências de fomento da ciência o CNPq e a FAPERJ pelo subsídio econômico.

A todas às pessoas que de forma direta ou indireta estiveram presentes.

A Victor Lopes, por ter colaborado de forma direta resolvendo as minhas dúvidas, sobre tudo na parte de programação.

Aos meus amigos e colegas da sala de estudo que mantiveram um entorno saudável de trabalho.

A meu pai Antonio pelo seu apoio incondicional em todo momento.

A minha mãe Dominga pelo amor e afeto incondicional sempre presente a pesar da distancia.

A o meu irmão Nilson e sua esposa, minha irmã Maritza e esposo, meu primo Manuel e sua esposa e sua irmã que fizeram possível o meu inicio no programa da Pós-Graduação da PUC-Rio.

Resumo

Manya Suni, Marco Antonio; Anda, Enrique Victoriano. **Efeito da interação spin-órbita nas propriedades físicas de um sistema Kondo**. Rio de Janeiro, 2017. 63p. Dissertação de Mestrado – Departamento de Física, Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro.

Neste trabalho, apresentamos um estudo das propriedades físicas de uma impureza magnética acoplada a um reservatório de elétrons submetidos à interação spin-órbita do tipo Rashba e Dresselhaus. O Hamiltoniano do sistema é submetido a uma transformação da base de representação de modo que ele é diagonal no número quântico helicoidal que assume um papel equivalente ao spin eletrônico em ausência da interação spin-orbita. O problema foi estudado num espaço unidimensional ocupado pelo estado fundamental do mar de Fermi que chamamos do subespaço S_1 caracterizado pela função de onda $|\psi_1\rangle$ e o resto do espaço de Hilbert é denominado subespaço S_2 . Para encontrar a energia do estado fundamental do sistema é necessário renormalizar o Hamiltoniano original no subespaço S_1 . Quando o Hamiltoniano renormalizado H_r atua sobre o subespaço S_1 , a energia do estado fundamental é definida em termos de funções $F_1(\Delta E)$ e $F_0(\Delta E)$ que satisfazem uma relação de autoconsistência. Estas funções foram resolvidas numericamente. Foi possível obter os números de ocupação em função do potencial do porta, com o qual determinamos a região onde o estado fundamental preserva as propriedades da simetria $SU(2)$ necessária para a existência do efeito Kondo. Além disso, conseguimos caracterizar uma função exponencial com um comportamento universal que estabelece uma fronteira da região dos parâmetros onde a existência do efeito Kondo é possível.

Palavras-chave

Efeito Kondo; Temperatura Kondo; Interação Spin-Órbita; Modelo de impurezas de Anderson; Simetria $SU(2)$

Abstract

Manya Suni, Marco Antonio; Anda, Enrique Victoriano (Advisor).
A Kondo system under the effect of spin-orbit interaction.
Rio de Janeiro, 2017. 63p. Dissertação de Mestrado – Departamento
de Física, Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro.

In this work, we present a study of the physical properties of a magnetic impurity coupled to a reservoir of electrons subjected to the spin-orbit interaction of the Rashba and Dresselhaus type. The Hamiltonian of the system is subjected to a transformation of the representation base, so that it is diagonal in the helical quantum number which assumes a role equivalent to the electronic spin in the absence of spin-orbit interaction. The problem was studied in a one-dimensional space occupied by the fundamental state of the Fermi Sea that we call the subspace S_1 characterized by the wave function $|\psi_1\rangle$ and the rest of the Hilbert space called the subspace S_2 . To find the energy of the fundamental state of the system it is necessary to renormalize the original Hamiltonian in the subspace S_1 . When the renormalized Hamiltonian (H_r) acts on the subspace S_1 , the ground state energy is defined in terms of the self-consistent functions $F_{1(\Delta E)}$ and $F_{0(\Delta)}$. These self-consistent functions have been solved numerically. It was possible to obtain the occupation numbers according to the potential of the door. With this calculation, we determine the region where the ground state preserves the properties of the symmetry $SU(2)$ required for the existence of the Kondo effect. In addition, we can characterize a function with a universal behavior of the exponential type, which establishes a boundary of the region of the parameters where the Kondo effect is possible.

Keywords

Kondo effect; Kondo temperature; Spin-Orbit Interaction; Anderson impurities model, $SU(2)$ symmetry

Sumário

1	Introdução	10
2	Hamiltoniano de Anderson e propriedades	15
3	Hamiltoniano de Anderson na presença da interação Spin-Órbita	19
3.1	Introdução	19
3.2	Modelo do sistema	20
3.3	Interação Spin-Órbita	21
3.3.1	Interação Spin-Órbita Rashba	22
3.3.2	Interação Spin-Órbita Dresselhaus	22
3.4	Hamiltoniano resultante do sistema	23
4	Mudança da base de representação do Hamiltoniano do sistema	25
4.1	Transformação do Hamiltoniano	26
5	Solução do problema pelo método de operadores de projeção	38
5.1	Método de operadores de projeção	38
5.2	Construção dos subespaços	40
5.3	Cálculo das funções autoconsistentes	45
6	Resultados e Conclusões	50
A	Anexo I: Mudança da base de representação do Hamiltoniano do sistema	56
A.1	Relação dos operadores	56
A.2	Relação de dispersão	59
A.3	Densidade de estados	61
	Referências bibliográficas	62

Lista de figuras

- Figura 1.1 PQ conectado por tunelamento quântico a um gás de elétrons em duas dimensões (Two-dimensional electron gas 2DEG) obtido mediante micrografia eletrônica [8]. 11
- Figura 1.2 Comportamento da resistividade como função da temperatura em ligas metálicas de $Mo - Nb$ com impureza ao $1\%Fe$ [4]. 12
- Figura 2.1 Esquema do modelo de uma impureza de Anderson. 15
- Figura 2.2 Representação de um sistema de cadeia linear interagindo com uma impureza magnética. 16
- Figura 2.3 Densidade de estados de uma impureza embebida numa matriz metálica descrita pelo modelo de Anderson, no regime Kondo [17]. 17
- Figura 2.4 Condutância de um sistema SET $GaAs/AlGaAs$ em duas dimensões [6] 18
- Figura 3.1 Modelo da cadeia linear infinita de dois canais de spin \uparrow e \downarrow acoplado a uma impureza representada por um ponto quântico 21
- Figura 4.1 Relação de dispersão das sub-bandas $\epsilon_{(k)}^+$, e $\epsilon_{(k)}^-$ numa cadeia linear, na presença da interação SO. $\alpha = \beta = 0.5$. 29
- Figura 4.2 Relação de dispersão da sub-banda $\epsilon_{(k)}^+$. Observamos o intervalo de acréscimo entre $2t$ e $2|z|$ da largura da banda pela presença da interação SO. 31
- Figura 4.3 Relação de dispersão da sub-banda $\epsilon_{(k)}^-$. Os estados $|k-\rangle$ são deslocados para o lado da borda negativa da banda, produzindo o acréscimo na largura da banda dado pelo intervalo $(-2|z|, -2t)$. 32
- Figura 4.4 Densidade de estados $\rho_{(\omega)}^-$ e $\rho_{(\omega)}^+$. Com uma interação SO ($\alpha = \beta = 0.7$). 33
- Figura 4.5 Relação de dispersão na aproximação quadrática. Por abaixo do nível de Fermi ($\epsilon_F = 0$) a energia é descrita pela relação de dispersão expandida na vizinhança de $k = 0$ e por acima do nível de Fermi pela relação de dispersão expandida na vizinhança de $k = \mp\pi$. As intensidades da interação SO $\alpha = \beta = 0.4$. 35
- Figura 4.6 Densidade de estados exata curvas da cor vermelha e violeta, e densidade de estados na aproximação quadrática curvas da cor verde e azul com a intensidade da interação SO, $\alpha = \beta = 0.4$. 36
- Figura 5.1 Representação esquemática do subespaço S_1 41
- Figura 5.2 Construção do subespaço S_2 como uma aplicação sucessiva de H 44

Figura 5.3	Representação hierárquica dos estados do subespaço S_2 como uma rede de Bethe infinita.	45
Figura 6.1	Número de ocupação total (curvas superpostas da parte superior), de helicidade positiva $\langle n_{d+} \rangle$ (as curvas da cor verde, vermelho e azul claros) e de helicidade negativa $\langle n_{d-} \rangle$ (as cores escuras) em função do potencial de porta V_g para diferentes valores da interação SO $ \gamma $, para uma largura da banda $D = 20$	51
Figura 6.2	Igual à figura 6.1, para uma semi largura da banda de $D = 64$.	51
Figura 6.3	Número de ocupação para uma semi largura da banda $D = 150$ e com valores da interação SO diferentes.	52
Figura 6.4	Acoplamento de SO em função do potencial de porta onde a ocupação $\langle n_{d-} \rangle$ é máxima para diferentes valores da largura da banda $2D$.	53
Figura 6.5	Comportamento da função coeficiente $g(D)$ como função de D	54

1 Introdução

O desenvolvimento na fabricação de dispositivos eletrônicos nas últimas décadas tem permitido construir sistemas físicos em semicondutores a escalas da ordem de 100\AA aproximadamente, onde os graus de liberdade dos elétrons são restringidos a duas, uma e zero dimensões (2-D, 1-D, 0-D) [1] denominados planos, fios e pontos quânticos (PQ).

Os primeiros PQ's começaram a ser construídos na década de 80, quando, em um filme contendo um composto semiconductor de cádmio e enxofre, ou compostos de cádmio e selênio, foram submetidos a temperaturas altas, e pelo aquecimento formaram-se nanocristais de semicondutores confinando elétrons no intervalo do espectro de absorção ótica do vermelho até o amarelo. Foi possível observar que o intervalo de absorção ótica dos PQ's, é devido à diferença de tamanho e de número de elétrons confinados pelos nanocristais [1]. Propriedades similares foram obtidas de PQs constituído sobre superfícies condutoras sobre as quais eram depositados contatos metálicos como mostrado na figura 1.1.

O PQ é uma estrutura pequena que apresenta um espectro de energia discreto devido ao seu tamanho, confina um número finito de n elétrons, que conectados a contatos pode flutuar de n a $n + 1$ ou $n - 1$, mostrando assim, o espectro de sua energia análogo às energias de ionização ou absorção e as transições eletrônicas de um orbital a outro dos átomos reais. Por estas características os PQ's são chamados de átomos artificiais e moléculas artificiais no caso de vários PQ's acoplados [2].

Devido às suas propriedades eletrônicas e óticas, eles têm potencial para serem usados na fabricação de dispositivos de grande utilidade, como portas quânticas e lasers.

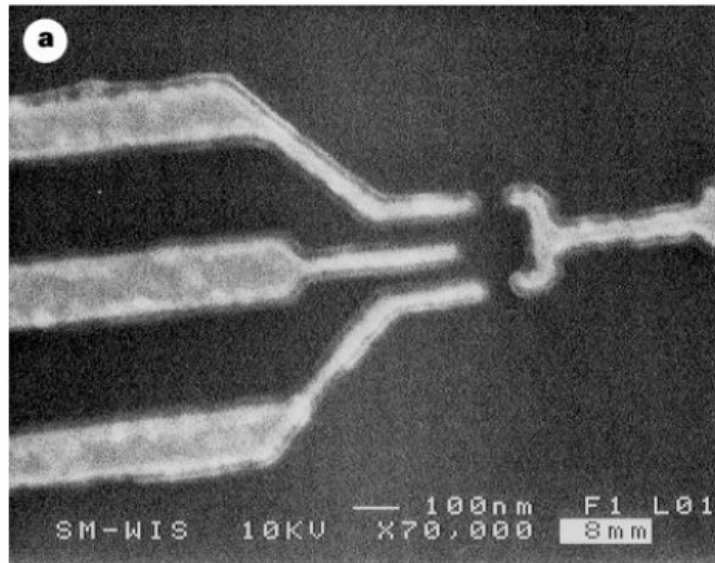


Figura 1.1: PQ conectado por tunelamento quântico a um gás de elétrons em duas dimensões (Two-dimensional electron gas 2DEG) obtido mediante micrografia eletrônica [8].

A figura 1.1 mostra um típico PQ do transistor de um elétron de 4 eletrodos, que permite o tunelamento quântico dos elétrons do PQ para o 2DEG a través do eletrodo superior e inferior do lado esquerdo, enquanto o eletrodo central esquerdo permite ajustar o nível de energia do PQ.

A física envolvida nos PQ's está relacionada diretamente com o estudo dos momentos magnéticos em metais com impurezas magnéticas, sistemas que foram estudados teoricamente pelo modelo de interação s-d [3]. Este modelo, da conta da presença do mínimo na resistividade em função da temperatura.

O mínimo da resistividade foi mostrado experimentalmente em ligas metálicas de $Mo-Nb$ e $Mo-Re$ [4] com uma concentração de 1% de impurezas de Ferro, que, ao contrário do comportamento da resistividade dos metais puros que tendem a zero monotonicamente quando $T \rightarrow 0$, divergia por baixo de um certo valor de temperatura. No gráfico da figura 1.2, ao diminuirmos a temperatura vemos que a resistividade diminui monotonicamente, mas, quando atinge uma determinada temperatura, em vez de continuar diminuindo, a resistividade começa a aumentar até um valor finito de saturação, evidenciando um mínimo na curva, um ponto de inflexão, aumentando ao aproximarmos a $T = 0$, [5, 6]. Este comportamento anômalo da resistividade foi associado à presença dos momentos magnéticos das impurezas de Ferro.

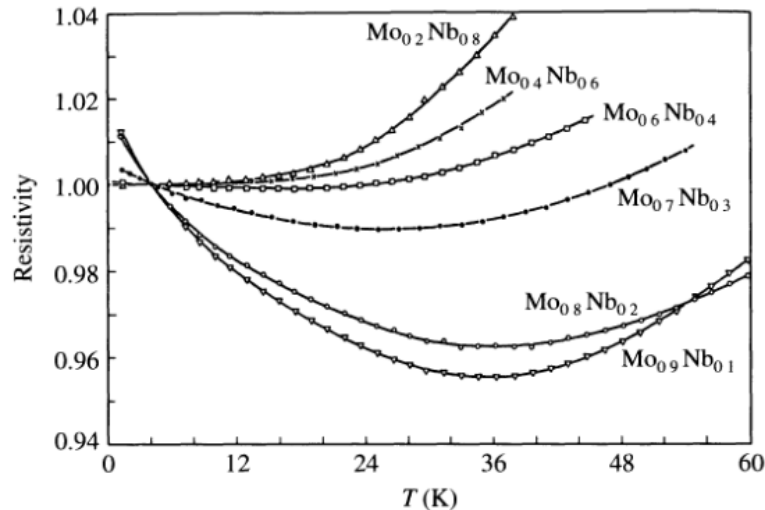


Figura 1.2: Comportamento da resistividade como função da temperatura em ligas metálicas de $Mo - Nb$ com impureza ao $1\%Fe$ [4].

A manifestação da interação entre o momento magnético da impureza e os elétrons de condução, a baixas temperaturas é descrito pelo efeito Kondo, o qual explica a existência do mínimo na resistividade em ligas metálicas com impurezas magnéticas [7], como resultado do espalhamento dos elétrons de condução devido às impurezas.

Jun Kondo (1963), considerando um sistema de uma impureza magnética interagindo com um reservatório de elétrons mediante a interação de troca J , mostrou por meio da teoria de perturbações até terceira ordem, a presença de um termo que depende do logaritmo da temperatura na expressão da resistividade. No assim chamado efeito Kondo, o elétron localizado da impureza com os elétrons deslocalizados de condução formam um estado singlete por baixo de uma determinada temperatura, denominada temperatura Kondo, T_k , [7], que corresponde aos mínimos das curvas na figura 1.2. Por baixo desta temperatura, as propriedades magnéticas e elétricas do material mudam, e como consequência, a resistividade obtida a partir da teoria de perturbações, não é mais válida.

Um PQ, colocado numa matriz metálica cumpre o papel de uma impureza magnética, seus elétrons interagem com os elétrons da banda metálica, tal que por baixo de T_k os spins dos elétrons de condução blindam completamente o spin do PQ formando um estado singlete de muitos corpos.

Estudos teóricos predisseram que os estados singletos tipo Kondo com PQ's em superfícies metálicas, permitiriam a construção de transistores de elétrons simples (SET pelas iniciais do inglês) [8]. Um sistema de SET, permite estudar as características do efeito Kondo em situações controladas

convencionalmente inacessíveis, variando o número de elétrons mediante potenciais de fontes e drenos de elétrons manipulados externamente.

Mais recentemente estudos deram uma grande atenção à temperatura Kondo nestes sistemas, quando considera-se a contribuição da interação Spin-Órbita (SO) no Hamiltoniano do sistema. A interação SO é de muita interesse em aplicações de dispositivos eletrônicos, já que o spin do elétron pode ser manipulado mediante campos externos mudando as características do transporte eletrônico [9]. A inclusão deste termo abre uma questão de qual seria a influência da interação SO sobre a temperatura de Kondo no PQ, ou impurezas magnéticas embebidas em sistemas onde esta interação é dominante. Não existe uma posição consensual na bibliografia sobre este tema [10–14].

Os estudos que incluem os efeitos da interação SO tinham sido desenvolvidos mediante diferentes técnicas e modelos, assim como por exemplo, o modelo Kondo-Rashba [12] estudado no regime de k pequeno, (k é o momento do elétron) mostrou que a temperatura de Kondo não sofre nenhuma modificação pela presença da interação SO. Por outro lado, estudos mediante a técnica NRG (*Numerical Renormalization Group*) [10,13,15], ou transformação Schrieffer-Wolff [11] do Hamiltoniano de Anderson indicam que a presença interação SO do tipo Rashba influencia favoravelmente o efeito Kondo, aumentando T_k .

Um estudo recente sobre T_k em presença da interação SO, incorpora a interação SO tipo Dresselhaus [16] além do termo Rashba, em um sistema de um ponto quântico conectado a um fio quântico, onde, o Hamiltoniano do sistema foi submetido à transformação Schrieffer-Wolff e resolvido pela técnica de NRG. Este estudo conclui que T_k aumenta exponencialmente devido à presença da interação SO [14].

Neste trabalho, utilizaremos o modelo de impurezas de Anderson na presença de interação Spin-Órbita para um sistema 1D, com objetivo de entrar no debate da influência que esta interação possui sobre T_k do sistema. Em sistemas unidimensionais, diferentemente dos sistemas bidimensionais, o espalhamento dos elétrons de condução devido à impureza envolvem espalhamentos de elétrons com os spins invertidos somente para trás e para frente. Como consequência, a interação de SO em sistemas 1D deve ser mais importante que em sistemas de 2D. Uma representação diagramática deste espalhamento é mostrada em [14], onde o processo de espalhamento para trás é suposto como acontecendo entre bandas, e o espalhamento para frente dentro da mesma banda. Neste estudo, o Hamiltoniano do sistema, na presença da interação SO, é transformado a um Hamiltoniano equivalente de uma impureza de Anderson, o que permitiu obter a temperatura de Kondo. É

importante salientar aqui que, nesta nova representação, os termos de um corpo são diagonais num número quântico que chamaremos de ν , diferente da situação sem (SO) quando o Hamiltoniano é diagonal no spin σ . Entretanto, diferente deste último caso, a energia dos estados do mar de Fermi, na presença da interação (SO), depende do valor de ν . Isto faz com que, em princípio este novo Hamiltoniano diagonal em ν não seja estritamente falando o Hamiltoniano de Anderson como será discutido nos próximos capítulos. Para o caso 1-D, é possível mostrar que o novo Hamiltoniano em determinadas regiões dos parâmetros possui as propriedades de um Hamiltoniano de Anderson tradicional, com todas as consequências que isto implica.

2

Hamiltoniano de Anderson e propriedades

Hamiltoniano de Anderson

O Hamiltoniano de impurezas de Anderson descreve a física associada a uma impureza magnética imersa numa matriz metálica.

A impureza magnética é um átomo magnético isolado (átomo com orbitais d ou f) colocado no meio de um metal hospedeiro não magnético, que, devido a suas camadas de valência interna incompleta, têm um momento magnético diferente de zero. A representação esquemática deste modelo pode-se ver na figura 2.1, onde a banda de energia do metal hospedeiro de largura $2D$ é preenchida até o nível de Fermi ϵ_F (região da cor cinza), e os elétrons desta banda são descritos pelos estados de Bloch $|k\sigma\rangle$ e caracterizados por uma energia ϵ_k e momento \vec{k} , enquanto que, o sítio da impureza é representado pelo orbital atômico $|d\rangle$ com o nível de energia ϵ_d .

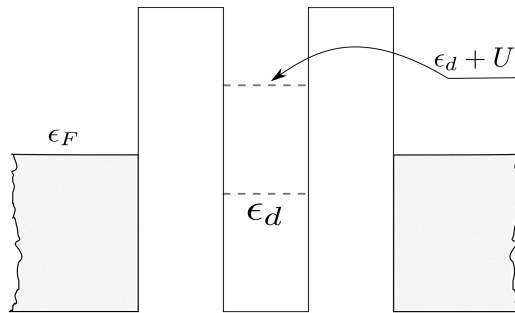


Figura 2.1: Esquema do modelo de uma impureza de Anderson.

O acoplamento do momento magnético da impureza com os spins dos elétrons de condução é descrito pela matriz de hibridização V_k , que é a responsável pela taxa de transição dos elétrons entre os dois contatos.

A impureza pode ter quatro estados possíveis dependendo da sua ocupação. O estado Vazio, ocupado por um elétron com spin para cima ou para abaixo com energia ϵ_d e o estado de dupla ocupação por dois elétrons de spins contrários com energia $2\epsilon_d + U$, o termo adicional U é a repulsão Coulombiana entre os dois elétrons no sítio da impureza, dado por,

$$U = \int \phi_d^*(r)\phi_d^*(r') \frac{e^2}{|r-r'|} \phi_d(r)\phi_d(r') dr dr', \quad (2-1)$$

A carga do elétron é representada por e sendo ϕ_d a função atômica do orbital d da impureza. O Hamiltoniano de Anderson no espaço real é expressado por:

$$H_A = \sum_{i=-N,\sigma}^N t c_{i\sigma}^\dagger c_{i+1\sigma} + \sum_{\sigma} \epsilon_d n_{d\sigma} + U n_{d\uparrow} n_{d\downarrow} + \sum_{\sigma} V (c_{0\sigma}^\dagger d_{\sigma} + d_{\sigma}^\dagger c_{0\sigma}). \quad (2-2)$$

O primeiro termo descreve os elétrons de condução de spin σ numa cadeia linear como mostra a figura 2.2, o segundo o elétron da impureza, o terceiro a repulsão Coulombiana no sítio da impureza entre dois elétrons e finalmente o quarto termo descreve o acoplamento do elétron da impureza com os elétrons de condução. Os operadores $c_{i\sigma}^\dagger, c_{i\sigma}, d_{\sigma}^\dagger, d_{\sigma}$ são os operadores de criação e aniquilação do elétron de condução e da impureza respectivamente, e $n_{d\sigma} = d_{\sigma}^\dagger d_{\sigma}$ é o operador número de ocupação do elétron da impureza.

Representamos na figura 2.2 o modelo de impureza de Anderson para nosso sistema, caso de uma cadeia linear acoplada com uma impureza magnética.

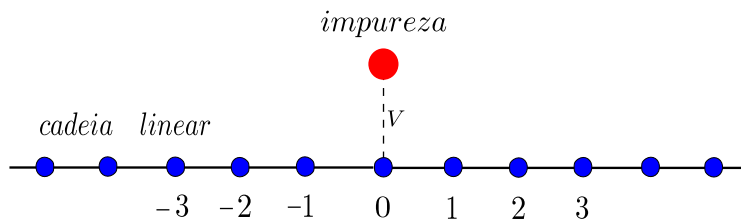


Figura 2.2: Representação de um sistema de cadeia linear interagindo com uma impureza magnética.

Na figura, o círculo vermelho representa uma impureza magnética interagindo com uma cadeia linear no sítio dela. À temperatura $T = 0$, o nível de Fermi separa os estados ocupados dos desocupados do mar de Fermi, e o momento magnético da impureza encontra-se completamente blindado pelos spins dos elétrons de condução, devido ao efeito Kondo.

O efeito Kondo é um fenômeno contido na solução do modelo de impurezas de Anderson, que aparece a temperaturas por baixo da temperatura característica T_k . Ela é associada à energia térmica necessária para destruir o acoplamento antiferromagnético dos elétrons de condução com os da impureza.

A manifestação do efeito Kondo pode ser observada na densidade de estados de energia da impureza. A figura 2.3 da referência [17], mostra o pico ressonante no nível de Fermi à temperatura $T = 0$, denominado ressonância

Kondo, e dois picos contíguos afastadas do pico da ressonância correspondentes aos níveis de ocupação ϵ_d e $\epsilon_d + U$ da impureza. Para situações de $T > T_k$, o pico Kondo desaparece completamente.

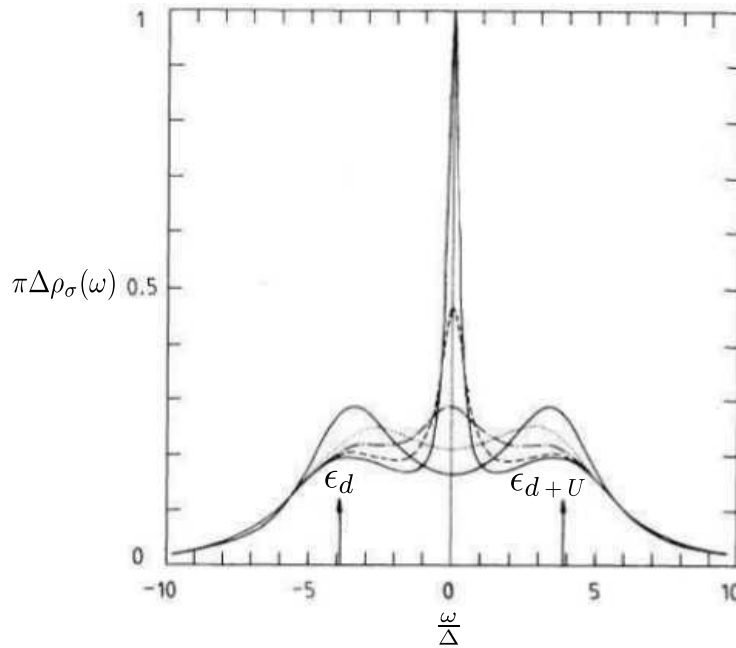


Figura 2.3: Densidade de estados de uma impureza embebida numa matriz metálica descrita pelo modelo de Anderson, no regime Kondo [17].

A ressonância Kondo ocorre no nível de Fermi à temperaturas $T < T_k$, e têm uma largura da ordem de T_k . O valor de T_k foi obtida por Duncan Haldane [18], no regime Kondo do modelo de Anderson dado por:

$$T_k = \sqrt{\Delta D} e^{-\frac{\pi}{2} \frac{|\epsilon_d|(|\epsilon_d|+U)}{\Delta U}}, \quad (2-3)$$

onde D é a semi largura da banda de energia, Δ é a energia de hibridização dada por,

$$\Delta = \pi V^2 \rho(\epsilon_F), \quad (2-4)$$

onde $\rho(\epsilon_F)$ é a densidade de estados da impureza no nível de Fermi ϵ_F .

A T_k se manifesta também na condutância de um sistema constituído por um PQ acoplado a contatos metálicos. O número de elétrons no PQ pode ser manipulado mediante potenciais externos. A figura 2.4 mostra a condutância de um sistema de transistor de um elétron simples (SET pelas iniciais do inglês) em função da temperatura. A partir de um valor determinado $T \simeq T_k$ a condutância começa aumentar até um valor máximo denominado limite quântico $\frac{2e^2}{h}$ da condutividade em $T = 0$ (gráfico esquerdo). No gráfico do lado direito este comportamento aparece mais claramente, onde a condutância é representado em função da temperatura $\frac{T}{T_k}$. Observa-se um ponto de inflexão

quando $T = T_k$, que, a partir dela, para temperaturas por baixo de T_k a condutividade aumenta, portanto, o efeito Kondo num PQ, a diferença do efeito Kondo no volume de um semiconductor, melhora a condutância.

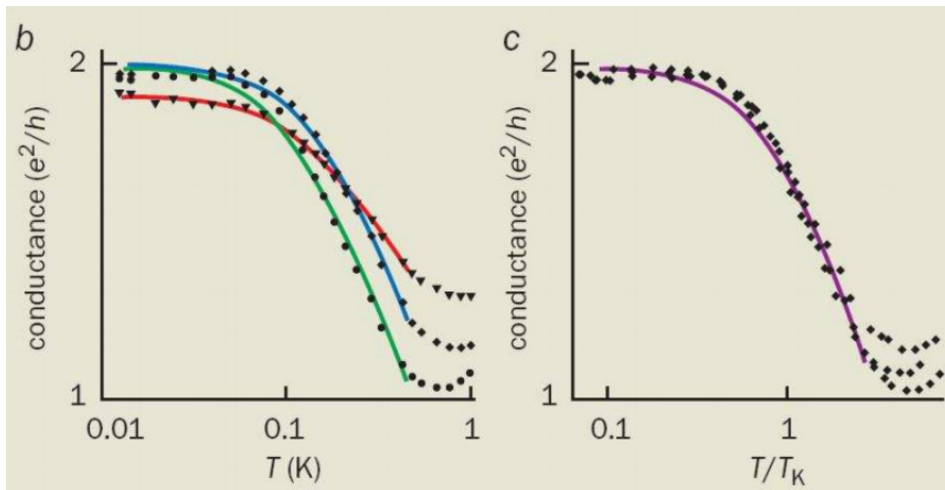


Figura 2.4: Condutância de um sistema SET *GaAs/AlGaAs* em duas dimensões [6]

Por outro lado, submetendo a impureza a um campo magnético, o efeito Kondo é destruído, porque ele quebra a degenerescência do spin na impureza.

Propriedades

As propriedades do Hamiltoniano de Anderson são determinados pelos parâmetros ϵ_d , U , V e a energia de hibridização Δ , eles são ajustados para obter os diferentes regimes do sistema com respeito à formação dos momentos magnéticos.

No regime quando o sistema não permite a formação de momentos magnéticos, $U \gg \Delta \gg \epsilon_d$, onde Δ é a largura do estado ressonante. Assim mesmo, quando $\Delta \gg \epsilon_F$ a carga flutua entre a impureza e os contatos, isto é o regime de flutuação de carga.

O regime quando o sistema permite a formação de momentos magnéticos $U \gg |\epsilon_d| \gg \Delta$, o nível de impureza se encontra ocupado por um elétron com energia ϵ_d que está por baixo do nível de Fermi ϵ_F . Neste regime, a energia Coulombiana U , inibe a ocupação dupla, e a energia gasta para colocar um segundo elétron é maior do que o nível de Fermi $\epsilon_d + U > \epsilon_F$. O sistema se encontra no regime Kondo.

Nosso interesse no presente estudo é este regime, em um sistema de um ponto quântico ocupado por um número finito impar de elétrons, conectado a um reservatório de elétrons na presença da interação SO.

3

Hamiltoniano de Anderson na presença da interação Spin-Órbita

3.1

Introdução

A caráter diagonal do Hamiltoniano de Anderson no espaço dos spins mais a interação spin-órbita no estudo de espalhamento de elétrons por impurezas magnéticas, não é mais mantido, porque a interação SO introduz os elementos não diagonais, e com ela as propriedades do estado fundamental do sistema muda.

Por outro lado, os resultados a este respeito como dissemos na introdução desta dissertação, não é única. A contribuição da interação SO sobre o espalhamento dos elétrons tem sido mostrado que devido a sua simetria de inversão temporal [19] ela não afeta o espalhamento dos elétrons e em consequência à temperatura Kondo também, mas, sim quebra a simetria da rotação do spin. Isto é atribuído ao fato do que a interação SO cumpre o rol de uma impureza não magnética elástica no espalhamento.

A maioria dos estudos do efeito da interação SO sobre o efeito Kondo são em duas dimensões, Por exemplo [12] propõe uma transformação do Hamiltoniano de um sistema 2-D de modo que o sistema pode ser analisado como sendo unidimensional. Neste análise, a temperatura Kondo renormalizada que em principio leva as contribuições da interação SO é idêntico à temperatura Kondo original, pelo que a interação SO não afeta o efeito Kondo.

Entretanto, outros resultados mostram que a interação SO muda a temperatura Kondo, em sistemas unidimensionais como bidimensionais. Em sistemas bidimensionais tem sido mostrado que a interação SO favorece o melhoramento da temperatura Kondo. Por exemplo, em [15], com um acoplamento da interação SO ajustável, estabelece duas configurações. A primeira, fixando o nível de Fermi, observa uma temperatura Kondo que depende fracamente da interação SO, ou seja, uma dependência quase linear, mas, quando o nível de Fermi é considerado dependente da interação SO, a temperatura Kondo depende exponencialmente da interação SO [11].

Mas em sistemas unidimensionais, o efeito da interação SO sobre a temperatura Kondo espera-se que seja diferente. Em [14], estuda o problema com a ideia que, em relação ao espalhamento dos elétrons de condução em sistemas bidimensionais, o espalhamento no caso unidimensional somente tem um grau de liberdade, para trás ou para o frente sobre o eixo do sistema. Esta natureza do espalhamento unidimensional implica que o efeito sobre a temperatura Kondo da interação SO é maior do que em sistemas bidimensionais. Como resultado desse estudo, mostra-se que a interação SO aumenta exponencialmente a temperatura Kondo, o que não concorda com resultado de [12]. Como podemos perceber, os efeitos da interação SO sobre os sistemas unidimensionais é ainda pouco esclarecida, pelo que planteamos um problema de um sistema unidimensional, uma cadeia linear infinita na aproximação de ligações fortes com a rede da estrutura cristalina periódica de modo que a simetria de traslação é satisfeita, onde a interação SO do tipo Rashba como de Dresselhaus estão presentes. O problema é tratado assumindo o modelo de uma impureza de Anderson, como descrevemos em seguida.

3.2

Modelo do sistema

O Hamiltoniano que descreve o nosso sistema é dado pelo operador H_A corresponde ao Hamiltoniano de Anderson (2-2) e H_{so} é o Hamiltoniano de Spin-Órbita (que será definido no seguinte item) cujas propriedades são estudadas no presente capítulo. O esquema dado pela figura 3.1 representa um PQ acoplado com um reservatório de elétrons de uma cadeia linear infinita de dois canais de spin “up” e “down” acoplados pela interação SO.

Na figura 3.1 se mostram as interações no espaço real, onde o círculo da cor vermelha representa o elétron da impureza com o spin para cima e para abaixo, e os círculos da cor azul representam os elétrons em cada sítio da cadeia com spins para cima e para abaixo respectivamente, sendo a a constante da rede e t o elemento diagonal do acoplamento dos elétrons entre átomos vizinhos na cadeia.

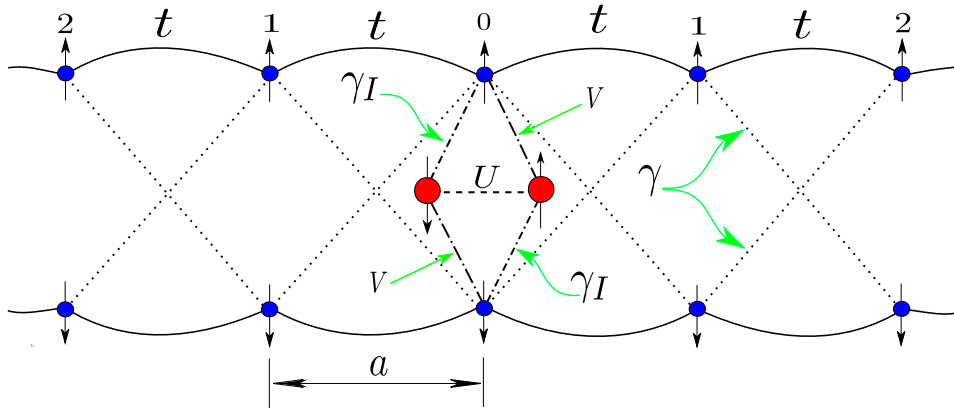


Figura 3.1: Modelo da cadeia linear infinita de dois canais de spin \uparrow e \downarrow acoplado a uma impureza representada por um ponto quântico

Desde a figura os termos t , U e V são os termos do Hamiltoniano de Anderson (2-2), pelo que, damos conta da aparição de dois termos adicionais que são: $\beta_I + i\alpha_I$ e $\beta + i\alpha$, correspondentes à interação SO impureza-cadeia e na cadeia respectivamente.

O modelo 3.1 representamos pelo Hamiltoniano,

$$H = H_A + H_{so}. \quad (3-1)$$

3.3

Interação Spin-Órbita

A solução não relativista da equação de Dirac para elétrons submetidos a um potencial externo V da origem a um acoplamento entre o grau de liberdade do spin e os graus de liberdade eletrônicos associados ao espaço real. Esta interação é denominada interação Spin-Órbita (SO) [20] e representada pelo operador Hamiltoniano.

$$H_{so} = -\frac{e\hbar}{4m^2c^2}(\hat{\sigma} \cdot [\nabla V(x, y, z) \times \mathbf{p}]), \quad (3-2)$$

A interação SO no limite não relativista da equação de Dirac emerge de forma natural na ordem de aproximação $\frac{v^2}{c^2}$, onde v e c são as velocidades do elétron e da luz respectivamente, $\hat{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ são as matrizes de Pauli, e é a carga do elétron e m a sua masa, $V(x, y, z)$ é o potencial externo atuando sobre os elétrons e \mathbf{p} o momento do elétron. A característica fundamental do Hamiltoniano de interação SO é que, ela preserva a simetria de inversão temporal [19].

No estudo de semicondutores, quando a interação SO é considerada, o desdobramento da degenerescência dos spins é produzido de duas formas, aplicando um campo magnético o que produz o efeito Zeeman, e em ausência do

campo magnético pela interação SO que acopla os graus de liberdade espacial e o spin eletrônico.

3.3.1

Interação Spin-Órbita Rashba

Num semicondutor a interação SO Rashba surge da assimetria do potencial de confinamento na direção z . O Hamiltoniano convencional, dado por Bychkov e Rashba [21], é obtido a partir da equação (3-2) impondo a assimetria do potencial na direção z . No caso de um potencial de confinamento na direção do eixo y é possível descrever o sistema como apresentado na figura 3.1. Ela descreve a interação do elétron no sítio j com o elétron do sítio $j + 1$ da cadeia linear, ao longo da direção x onde mostramos além da interação SO entre os elétrons da cadeia também a contribuição da interação SO da impureza com a cadeia linear no sítio $j = 0$. Vamos estudar a física descrita pelo Hamiltoniano (3-1) para um sistema unidimensional.

Na aproximação de ligações fortes entre primeiros vizinhos dado por [22], o Hamiltoniano de interação SO Rashba pode ser escrito como,

$$H_R = \sum_{l,\sigma,\sigma'} -\alpha c_{l+1\sigma'}^\dagger (i\sigma_y)_{\sigma\sigma'} c_{l\sigma} + h.c. - \sum_{\sigma',\sigma} \alpha_I (c_{0\sigma'}^\dagger (i\sigma_y)_{\sigma\sigma'} d_\sigma + d_{\sigma'}^\dagger (i\sigma_y)_{\sigma\sigma'} c_{0\sigma}), \quad (3-3)$$

onde l identifica o sítio do átomo sobre a rede, α é a interação SO Rashba entre o sítio l e $l + 1$, α_I interação SO Rashba da impureza e a cadeia, $c_{l\sigma}^\dagger$ ($c_{l\sigma}$) é o operador de criação (aniquilação) do elétron no sítio l com spin σ .

O parâmetro α é proporcional ao gradiente do potencial de confinamento $\nabla V(x, y, z)$. Este parâmetro define a intensidade da interação spin órbita [9], e $(i\sigma_y)_{\sigma\sigma'}$ são as componentes da matriz de Pauli na direção y . O Hamiltoniano (3-3) é um operador que aniquila um elétron no sítio l com spin σ e cria outro no sítio $l + 1$ com spin oposto, assim como também da lugar à transição do elétron desde a impureza para cadeia e vice-versa, com os spins invertidos, e como consequência o spin σ não é um bom número quântico deste Hamiltoniano já que ele não é diagonal no spin.

3.3.2

Interação Spin-Órbita Dresselhaus

Nas estruturas de semicondutores que não possuem centros de inversão, como por exemplo em compostos de GaAs e InSb, a interação SO desdobra a degenerescência do spin devido a esta assimetria.

A falta de simetria da estrutura cristalina, produz um potencial assimétrico que contribui à interação SO, chamado interação SO tipo Dresselhaus [16]. Ele é um efeito puramente do campo elétrico microscópico da rede cristalina, presente em semicondutores sem centros de inversão. Adotando a mesma notação usada para o termo Rashba esta contribuição ao Hamiltoniano de SO pode ser escrita,

$$H_D = \sum_{l,\sigma,\sigma'} -\beta c_{l+1\sigma'}^\dagger (i\sigma_x)_{\sigma\sigma'} c_{l\sigma} + h.c. - \sum_{\sigma',\sigma} -\beta_I (c_{0\sigma'}^\dagger (i\sigma_x)_{\sigma\sigma'} d_\sigma + d_{\sigma'}^\dagger (i\sigma_x)_{\sigma\sigma'} c_{0\sigma}), \quad (3-4)$$

O β e β_I são os elementos da matriz Dresselhaus devido ao potencial criado pela rede cristalina na cadeia e na impureza respectivamente. $c_{l\sigma}^\dagger$ ($c_{l\sigma}$) são os operadores de criação (aniquilação) de elétrons com um spin σ e σ_x é a componente x das matrizes de Pauli, enquanto, os operadores $c_{0\sigma}, c_{0\sigma}^\dagger$ atuam unicamente sobre o elétron do sítio mais próximo à impureza.

Portanto, a contribuição total da interação SO para o Hamiltoniano do sistema (3-1) pode ser dado pela soma dos Hamiltonianos (3-3), (3-4), que, para um sistema unidimensional, é expressado na sua forma mais geral como,

$$H_{so} = - \sum_{l,\sigma,\sigma'} c_{l+1\sigma}^\dagger (i\Upsilon)_{\sigma,\sigma'} c_{l\sigma'} + h.c. + \sum_{\sigma\sigma'} \left(c_{0\sigma}^\dagger (i\Upsilon_I)_{\sigma,\sigma'} d_{\sigma'} + d_{\sigma'}^\dagger (i\Upsilon_I)_{\sigma,\sigma'} c_{0\sigma'} \right) \quad (3-5)$$

sendo Υ, Υ_I as matrizes de interação SO na cadeia e na impureza respectivamente,

$$\Upsilon = \begin{pmatrix} 0 & \gamma \\ \gamma^* & 0 \end{pmatrix}, \quad (3-6)$$

$$\Upsilon_I = \begin{pmatrix} 0 & \gamma_I \\ \gamma_I^* & 0 \end{pmatrix}, \quad (3-7)$$

onde $\gamma = \beta + i\alpha$, e $\gamma_I = \beta_I + i\alpha_I$.

3.4

Hamiltoniano resultante do sistema

O Hamiltoniano (3-1) que inclui o Hamiltoniano de Anderson (2-2) e a interação SO (3-5), é reagrupado como uma soma de três Hamiltonianos: a cadeia linear, o PQ e o acoplamento entre a cadeia linear e o PQ,

$$H = h_{cl} + h_I + h_c. \quad (3-8)$$

Usamos a letra minúscula h para representar os Hamiltonianos no espaço real, assim, h_{cl}, h_I e h_c representam o Hamiltoniano da cadeia linear, da

impureza e o Hamiltoniano de acoplamento entre a impureza e a cadeia respectivamente,

$$h_{cl} = \sum_{l=-N,\sigma}^N t c_{l\sigma}^\dagger c_{l+1,\sigma} + \sum_{l=-N,\sigma,\sigma'}^N c_{l+1\sigma}^\dagger (i\mathcal{Y})_{\sigma\sigma'} c_{l\sigma} + h.c., \quad (3-9)$$

$$h_I = \sum_{\sigma} \epsilon_d n_{d\sigma} + U n_{d\sigma} n_{d\bar{\sigma}}, \quad (3-10)$$

$$h_c = \sum_{\sigma} V (c_{0\sigma}^\dagger d_{\sigma} + d_{\sigma}^\dagger c_{0\sigma}) + \sum_{\sigma,\sigma'} (c_{0\sigma'}^\dagger (i\mathcal{Y})_{\sigma\sigma'} d_{\sigma} + d_{\sigma}^\dagger (i\mathcal{Y})_{\sigma\sigma'} c_{0\sigma}). \quad (3-11)$$

Como dissemos, o sistema unidimensional em consideração tem a simetria de traslação, então, usando o teorema de Bloch, é possível diagonalizar parcialmente o Hamiltoniano representando ele no espaço recíproco do momento linear k . Portanto, reescrevemos os Hamiltonianos (3-9), (3-10) e (3-11) no espaço de Fourier, mediante a transformação:

$$c_{l\sigma} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k c_{k\sigma} e^{ikx_l} \quad c_{0\sigma} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k c_{k\sigma}. \quad (3-12)$$

Introduzindo a transformada de Fourier (3-12) no Hamiltoniano da cadeia linear (3-9), a propriedade de traslação produz o coeficiente $\cos(ka)$ na parte diagonal, e $\sin(ka)$ na parte não diagonal de spin correspondente à interação SO. Esclarecemos que a notação h_{cl} do Hamiltoniano da cadeia linear, no espaço recíproco é mais apropriado representar por H_{mf} como o Hamiltoniano do mar de Fermi. Como resultado da transformação, as termos do Hamiltoniano total (3-8) são:

$$H_{mf} = \sum_{k,\sigma} \epsilon_k n_{k\sigma} + \sum_k -2 \sin(ka) (\gamma c_{k\uparrow}^\dagger c_{k\downarrow} + \gamma^* c_{k\downarrow}^\dagger c_{k\uparrow}) \quad (3-13)$$

$$H_I = \sum_{\sigma} \epsilon_d n_{d\sigma} + U n_{d\uparrow} n_{d\downarrow} \quad (3-14)$$

$$H_c = \sum_{k,\sigma} V_k (c_{k\sigma}^\dagger d_{\sigma} + d_{\sigma}^\dagger c_{k\sigma}) + i \sum_k (\gamma_I c_{k\uparrow}^\dagger d_{\downarrow} + \gamma_I^* c_{k\downarrow}^\dagger d_{\uparrow} - \gamma_I d_{\uparrow}^\dagger c_{k\downarrow} - \gamma_I^* d_{\downarrow}^\dagger c_{k\uparrow}) \quad (3-15)$$

onde $\epsilon_k = -2t \cos(ka)$

4

Mudança da base de representação do Hamiltoniano do sistema

Embora, as propriedades do Hamiltoniano da impureza de Anderson sejam bem conhecidas, a generalização deste Hamiltoniano (3-8) na presença da interação Spin-Órbita descreve um sistema que é de uma complexidade maior porque ele não é mais diagonal no espaço dos spins, o que implica que o spin eletrônico não é mais um bom número quântico.

Portanto, vamos procurar uma nova base para representar o Hamiltoniano na qual ele seja diagonal. Com este fim, propomos uma transformação de [14] na qual (3-8) possa ser escrita de forma equivalente ao Hamiltoniano de Anderson conhecido.

$$\begin{aligned}c_{k\uparrow} &= \frac{1}{\sqrt{2}}(c_{k+} + ie^{i\theta}c_{k-}) \\c_{k\downarrow} &= \frac{1}{\sqrt{2}}(e^{-i\theta}c_{k+} - ic_{k-}),\end{aligned}\tag{4-1}$$

$$\begin{aligned}d_{\uparrow} &= \frac{1}{\sqrt{2}}(d_{+} + ie^{i\theta_a}d_{-}) \\d_{\downarrow} &= \frac{1}{\sqrt{2}}(e^{-i\theta_a}d_{+} - id_{-}).\end{aligned}\tag{4-2}$$

A fase $e^{i\theta}$ que consta na transformação dos operadores $c_{k\sigma}$, assim como $e^{i\theta_a}$ para os operadores d_{σ} , são introduzidas com a finalidade de diagonalizar o Hamiltoniano, o que vai implicar em condições que estas fases devam satisfazer. Cabe explicitar que os novos operadores $c_{k\nu}^{\dagger}c_{k\nu}$, $d_{\nu}^{\dagger}d_{\nu}$ devem satisfazer as propriedades de anti-comutação dos férmions.

$$\begin{aligned}[c_{k\nu}^{\dagger}c_{k'\nu'}]_{+} &= \delta_{kk'}\delta_{\nu\nu'} \\[d_{\nu}^{\dagger}d_{\nu'}]_{+} &= \delta_{\nu\nu'},\end{aligned}\tag{4-3}$$

onde ν é um número quântico no espaço transformado; $\nu = \pm$

4.1

Transformação do Hamiltoniano

O Hamiltoniano que descreve o mar de Fermi (3-13) está representado pelo termo diagonal no spin e o termo de Spin-Órbita não diagonal. Para os fins da transformação, ele pode ser escrito como,

$$H_{mf} = \sum_k \left(\epsilon_k (c_{k\uparrow}^\dagger c_{k\uparrow} + c_{k\downarrow}^\dagger c_{k\downarrow}) - 2 \sin(ka) (\gamma c_{k\uparrow}^\dagger c_{k\downarrow} + \gamma^* c_{k\downarrow}^\dagger c_{k\uparrow}) \right). \quad (4-4)$$

A transformação dos elementos diagonais de (4-4) na nova base é praticamente direta $|k\sigma\rangle \rightarrow |k\nu\rangle$, mas os elementos não diagonais correspondentes à interação SO precisam uma condição adicional que fixa o valor do ângulo θ na transformação (4-1) para que o Hamiltoniano (4-4) seja completamente diagonal. Assim como se mostra no apêndice (A) a relação é:

$$(-i(\beta + i\alpha) + i(\beta - i\alpha)e^{i2\theta}) = 0, \quad (4-5)$$

que, equivalentemente podemos escrever como,

$$\tan(\theta) = \frac{\alpha}{\beta}, \quad (4-6)$$

com o qual (4-4) se reduz à forma diagonal no espaço $|k\nu\rangle$,

$$H_{mf} = \sum_{k,\nu} \epsilon_{(k)}^\nu c_{k\nu}^\dagger c_{k\nu}. \quad (4-7)$$

Onde

$$\epsilon_{(k)}^\nu = \epsilon_k + \nu 2|\gamma| |\sin(ka)|, \quad (4-8)$$

sendo o módulo da interação SO,

$$|\gamma| = \sqrt{\alpha^2 + \beta^2}. \quad (4-9)$$

Desenvolvendo um raciocínio completamente equivalente, como mostramos no apêndice (A-3), o Hamiltoniano da impureza (3-14) pode ser escrito na nova base como,

$$H_I = \sum_\nu \epsilon_d n_{d\nu} + U n_{d+} n_{d-}, \quad (4-10)$$

o que nos permite concluir que na nova base caracterizada pelo número quântico ν , o Hamiltoniano da impureza adota a mesma forma que na base do spin em ausência da interação SO. Com respeito ao termo de acoplamento (3-15), a transformação envolve operadores no sítio da impureza assim como também operadores no mar de Fermi acoplados, por isso tratamos esta transformação separadamente tal como segue.

O Hamiltoniano (3-15) representa os acoplamentos dos elétrons da banda de condução e o elétron da impureza. Quando o acoplamento se dá com elétrons com spins na mesma direção, ele corresponde aos elementos do termo híbrido do modelo de Anderson tradicional, mas quando o acoplamento envolve elétrons de spins opostos ele provem do acoplamento SO.

De forma equivalente ao realizado para os termos anteriores, e por simplicidade, consideramos que os coeficientes dos elementos não diagonais da transformação mantêm a mesma relação da condição (4-6) estabelecida para diagonalizar o Hamiltoniano de mar de Fermi, cujos detalhes estão no apêndice (A). O termo não diagonal de (3-15) é transformado aplicando a transformação (4-1) sobre os operadores da banda de condução e (4-2) sobre os operadores no sítio da impureza.

Com o objetivo que o Hamiltoniano seja diagonal na nova representação, os elementos não diagonais devem ser iguais a zero (ver a expressão (A-12) do apêndice). É possível verificar que, neste caso, o ângulo θ_d deve satisfazer

$$e^{i\theta_d} = \frac{-iV_k + (\beta_I + i\alpha_I)e^{-i\theta}}{-iV_k + (\beta_I - i\alpha_I)e^{i\theta}} e^{i\theta}. \quad (4-11)$$

A relação (4-11) pode ser escrito explicitamente como,

$$e^{i(\varphi)}(V_k \sin(\phi) + 2i(\beta_I \sin(\varphi) - \alpha_I \cos(\varphi))) = 0, \quad (4-12)$$

onde $\phi = \frac{\theta - \theta_d}{2}$, e $\varphi = \frac{\theta + \theta_d}{2}$. A única forma de satisfazer esta igualdade é que a parte real e a parte imaginária sejam iguais ao zero.

$$V_k \sin(\phi) = 0 \quad (4-13)$$

$$(\beta_I \sin(\varphi) - \alpha_I \cos(\varphi)) = 0. \quad (4-14)$$

A parte real (4-13) requer a condição $\theta_d = \theta + n\pi$, e a imaginária (4-14) a condição,

$$\tan(\varphi) = \frac{\alpha_I}{\beta_I}. \quad (4-15)$$

A relação (4-15) é semelhante à (4-6). Por simplicidade vamos supor que a relação entre a intensidade da interação SO Rashba α e a interação SO Dresselhaus β mantenham a mesma proporcionalidade que as respectivas interações da impureza com o mar de Fermi α_I e β_I , tal que seja possível escrever $\alpha_I = \delta\alpha$ e $\beta_I = \delta\beta$. Com esta proporcionalidade dada pelo parâmetro δ , a condição (4-15) reproduz $\tan(\varphi) = \frac{\alpha}{\beta}$, e ($\varphi = \theta$), que é, exatamente, a

condição (4-6) estabelecida para diagonalizar o Hamiltoniano do mar de Fermi. Caso tivéssemos suposto que a contribuição Dresselhaus (3-4) fosse zero, estas relações seriam satisfeitas em forma automática.

Com todas as condições estabelecidas nesta transformação, o Hamiltoniano que descreve o acoplamento entre o mar de Fermi e a impureza, incluindo a interação SO no PQ, é,

$$H_c = \sum_{k,\nu} (\Gamma_k^\nu c_{k\nu}^\dagger d_\nu + \Gamma_k^{\nu*} d_\nu^\dagger c_{k\nu}), \quad (4-16)$$

com os elementos da matriz de acoplamento Γ_k^ν dados por,

$$\Gamma_k^\nu = V_k + i\nu\delta|\gamma|, \quad (4-17)$$

onde $|\gamma|$ é o acoplamento da interação SO no volume definido em (4-9), e δ é fator de proporcionalidade da interação SO entre a impureza e o mar de Fermi, já mencionado antes.

Agrupando os Hamiltonianos transformados (4-7), (4-10) e (4-16), o Hamiltoniano do sistema pode ser escrito na nova base como,

$$H = \sum_{k,\nu} \epsilon_{(k)}^\nu c_{k\nu}^\dagger c_{k\nu} + \sum_\nu \epsilon_d n_{d\nu} + U n_{d+} n_{d-} + \sum_{k\nu} (\Gamma_k^\nu c_{k\nu}^\dagger d_\nu + \Gamma_k^{\nu*} d_\nu^\dagger c_{k\nu}), \quad (4-18)$$

onde $\epsilon_{(k)}^\nu$ é definido por (4-8), Γ_k^ν em (4-17), enquanto os termos da impureza no espaço transformado possuem os mesmos parâmetros definidos no Hamiltoniano de Anderson tradicional.

Vemos que (4-18) é uma expressão semelhante à expressão do Hamiltoniano de impureza de Anderson, mas a energia do mar de Fermi depende do número quântico ν .

Também é verdade que num extenso intervalo de k , (a extensão deste intervalo depende, como veremos, do valor da interação spin-órbita), é possível a existência de um valor de k' que satisfaça $\epsilon_{(k)}^+ = \epsilon_{(k')}^-$ onde $\epsilon_{(k)}^\nu = -2t \cos(ka) + \nu|\gamma||\sin(ka)|$. Isto mostra que a densidade de estados nesta região de $\epsilon_{(k)}^+$ é idêntica a $\epsilon_{(k)}^-$.

Na análise que segue adotaremos a suposição de que V_k seja independente de k . A fim de colocar estas ideias dentro de um formalismo mais matemático, escrevemos a expressão (4-8) na sua forma exponencial, e com ela conseguimos expressar a relação de dispersão em termos da função cosseno, com a finalidade de obter uma densidade de estados ρ^ν . Para tal efeito tratamos (4-8) as regiões $k < 0$ e $k > 0$ separadamente,

$$\epsilon_{(k)}^{\nu} = -2t \cos(ka) + \nu 2|\gamma| \sin(ka), \quad k > 0 \quad (4-19)$$

$$\epsilon_{(k)}^{\nu} = -2t \cos(ka) - \nu 2|\gamma| \sin(ka), \quad k < 0. \quad (4-20)$$

As relações de dispersão (4-8) correspondem a duas funções pares em k das duas sub-bandas, ϵ_k^+ e ϵ_k^- , tal como mostra a figura 4.1.

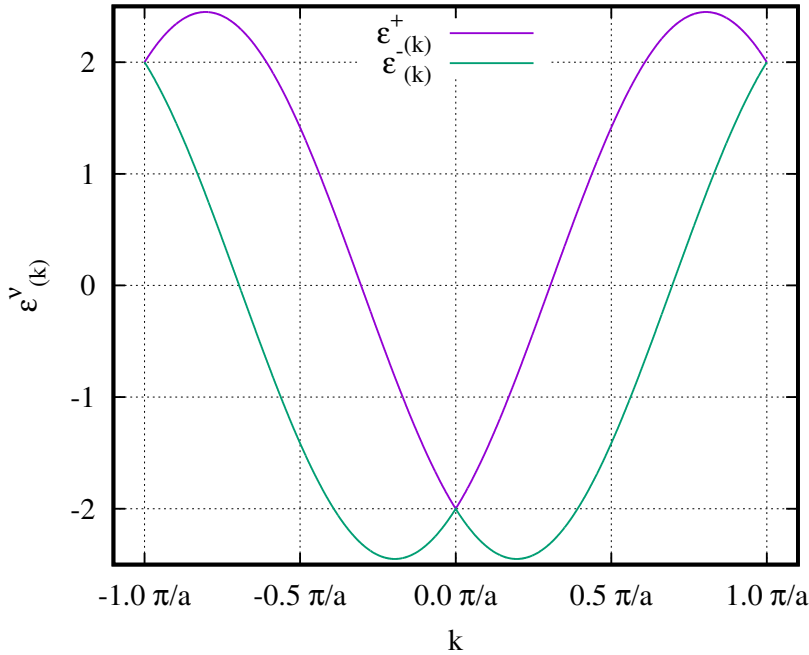


Figura 4.1: Relação de dispersão das sub-bandas $\epsilon_{(k)}^+$, e $\epsilon_{(k)}^-$ numa cadeia linear, na presença da interação SO. $\alpha = \beta = 0.5$.

No gráfico 4.1, o eixo da energia ϵ_k^{ν} está dado em unidades do parâmetro t , que, a partir daqui, será usado como unidade para todos os cálculos da energia dentro deste capítulo. Os valores utilizados para as constantes da interação SO nas figuras são bem maiores que as que correspondem à realidade [22]. Fazemos isto com o único propósito de ilustrar em forma clara os efeitos da interação SO sobre as bandas de energia do sistema.

A fim de obter uma densidade de estados similar à densidade de estados de uma cadeia linear, reescrevemos as relações de dispersão (4-19) reagrupando termos exponenciais das funções trigonométricas (veja apêndice A.2). É possível obter,

$$\epsilon_{(k)}^{\nu} = -2|z| \cos(ka + \nu \vartheta_k), \quad (4-21)$$

onde definimos $z = |z|e^{i\vartheta}$, o módulo $|z| = \sqrt{t^2 + |\gamma|^2}$, o argumento de z é $\vartheta = \tan^{-1}(\frac{|\gamma|}{t})$, e a defasagem $\vartheta_k = -\vartheta$ para $k < 0$ e $\vartheta_k = \vartheta$ para $k > 0$.

Partindo da definição formal da densidade de estados e separando as contribuições para $k > 0$ e $k < 0$, escrevemos,

$$\rho^\nu(\omega) = \frac{1}{N} \sum_{k>0} \delta(\omega - \epsilon_{(k)}^\nu) + \frac{1}{N} \sum_{k<0} \delta(\omega - \epsilon_{(k)}^\nu), \quad (4-22)$$

onde $\rho^\nu(\omega)$ é a densidade total do sistema, que, no limite termodinâmico, pode ser escrita como:

$$\rho^\nu(\omega) = \frac{a}{2\pi} \int_{-\pi}^0 \delta(\omega - \epsilon_{(k)}^\nu) dk + \frac{a}{2\pi} \int_0^\pi \delta(\omega - \epsilon_{(k)}^\nu) dk. \quad (4-23)$$

Efetuada a mudança da variável de integração k pela energia ϵ_k^ν , a expressão da densidade resulta,

$$\begin{aligned} \rho_{(\omega)}^\nu &= \frac{a}{2\pi} \int_{\epsilon_{(-\pi)}^\nu}^{\epsilon_{(0)}^\nu} \delta(\omega - \epsilon_{(k<0)}^\nu) \left(\frac{d\epsilon_{(k<0)}^\nu}{dk_{<0}} \right)^{-1} d\epsilon_{(k<0)}^\nu \\ &+ \frac{a}{2\pi} \int_{\epsilon_{(0)}^\nu}^{\epsilon_{(\pi)}^\nu} \delta(\omega - \epsilon_{(k>0)}^\nu) \left(\frac{d\epsilon_{(k>0)}^\nu}{dk_{>0}} \right)^{-1} d\epsilon_{(k>0)}^\nu, \end{aligned} \quad (4-24)$$

com as derivadas respectivas,

$$\frac{d\epsilon_{(k)}^\nu}{dk_{>0}} = 2|z|a \sin(ka + \nu\vartheta) \quad (4-25)$$

$$\frac{d\epsilon_{(k)}^\nu}{dk_{<0}} = 2|z|a \sin(ka - \nu\vartheta), \quad (4-26)$$

onde $k_{<0}, k_{>0}$ faz referencia as regiões $k < 0$ e $k > 0$. É possível concluir que as expressões (4-25), (4-26) satisfazem

$$\left. \frac{d\epsilon_{(k)}^\nu}{dk_{>0}} \right|_{k \rightarrow 0^+} \neq \left. \frac{d\epsilon_{(k)}^\nu}{dk_{<0}} \right|_{k \rightarrow 0^-}. \quad (4-27)$$

Este comportamento da derivada indica que a densidade de estados sofre uma descontinuidade em $k = 0$ e $k = \pm n\pi$. Este fato pode ser claramente observado na densidade de estados obtido a partir do gráfico seguinte,

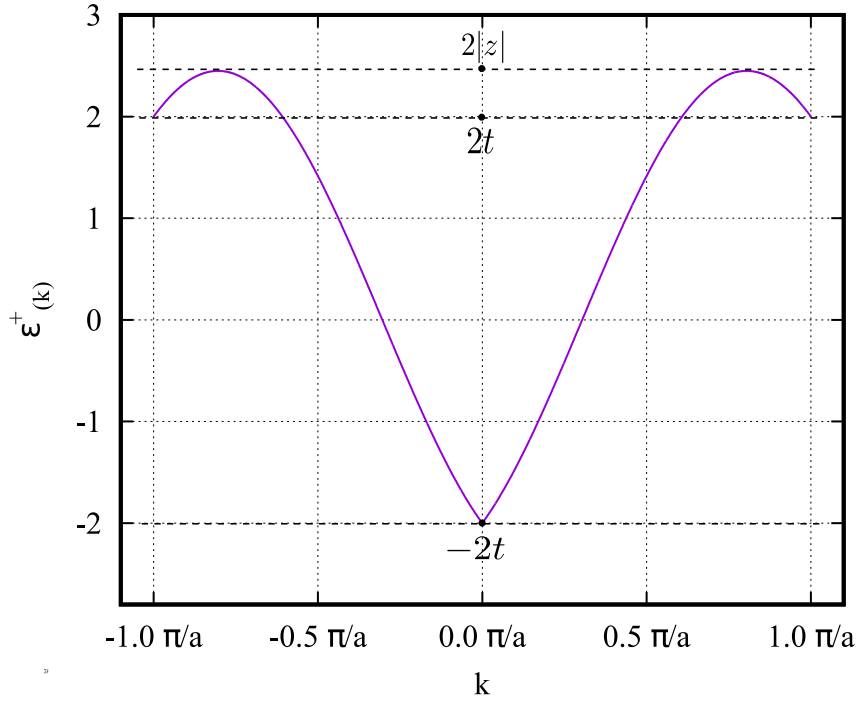


Figura 4.2: Relação de dispersão da sub-banda $\epsilon_{(k)}^+$. Observamos o intervalo de acréscimo entre $2t$ e $2|z|$ da largura da banda pela presença da interação SO.

A densidade de estados da relação de dispersão $\epsilon_{(k)}^+$ mostrada na figura 4.2 é obtida calculando as integrais de (4-24) como mostramos no apêndice A.3. O que resulta,

$$\rho_{(\omega)}^+ = \begin{cases} \frac{2}{\pi\sqrt{4|z|^2 - \omega^2}}, & 2t \leq \omega \leq 2|z| \\ \frac{1}{\pi\sqrt{4|z|^2 - \omega^2}}, & -2t \leq \omega < 2t \\ 0, & -2|z| \leq \omega < -2t. \end{cases} \quad (4-28)$$

Como resultado da degenerescência mencionada, a densidade de estados (4-28) no intervalo $2t \leq \omega \leq 2|z|$ é o dobro da densidade de estados no intervalo $-2t \leq \omega \leq 2t$ e zero no intervalo até o valor de $\omega - 2|z|$.

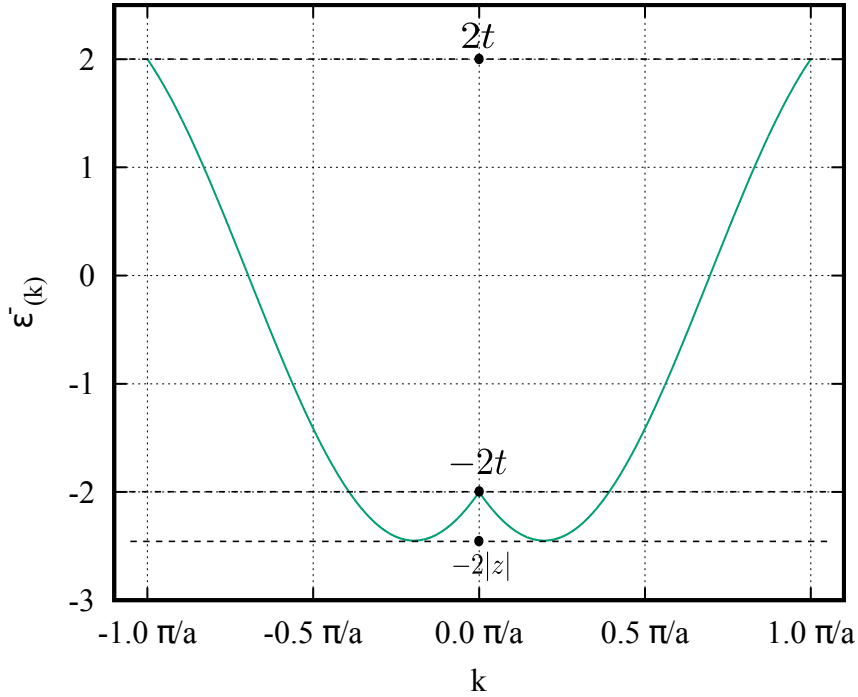


Figura 4.3: Relação de dispersão da sub-banda $\epsilon_{(k)}^-$. Os estados $|k-\rangle$ são deslocados para o lado da borda negativa da banda, produzindo o acréscimo na largura da banda dado pelo intervalo $(-2|z|, -2t)$.

A densidade de estados da sub-banda correspondente à relação de dispersão $\epsilon_{(k)}^-$ da figura 4.3 pode ser obtida de forma análoga ao caso anterior (ver apêndice A.3),

$$\rho_{(\omega)}^- = \begin{cases} 0, & 2t < \omega \leq 2|z| \\ \frac{1}{\pi\sqrt{4|z|^2 - \omega^2}}, & -2t < \omega \leq 2t \\ \frac{2}{\pi\sqrt{4|z|^2 - \omega^2}}, & -2|z| \leq \omega \leq -2t. \end{cases} \quad (4-29)$$

A diferença fundamental entre as densidades de estados das duas sub-bandas de energia pode ser sintetizada afirmando que uma é igual a outra com a frequência ω invertida $\rho_{(-\omega)}^+ = \rho_{(\omega)}^-$. Isto pode ser visto com maior clareza num gráfico da densidade de estados $\rho_{(-\omega)}^+$ e $\rho_{(\omega)}^-$ na figura 4.4.

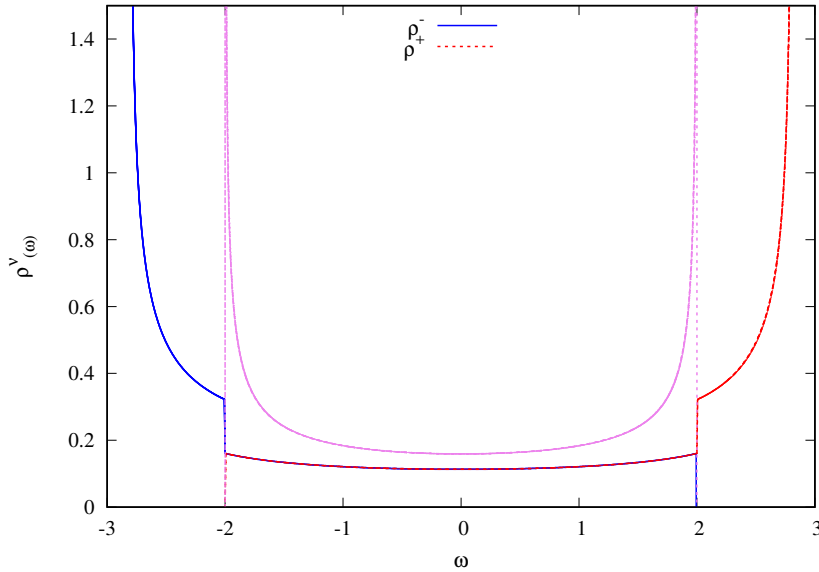


Figura 4.4: Densidade de estados $\rho_{(\omega)}^{-}$ e $\rho_{(\omega)}^{+}$. Com uma interação SO ($\alpha = \beta = 0.7$).

As curvas da densidade de estados da figura 4.4 mostram que a interação SO provoca uma descontinuidade nas bordas da banda no valor de $\omega = 2t$ e $\omega = -2t$. Além disso a distribuição de estados é deslocada simetricamente com respeito $\omega = 0$. Assim, os estados da sub-banda positiva são deslocados à região de energia positiva com área duplicada, enquanto aos estados da sub-banda negativa são deslocados à região de energia negativa, também com a área duplicada. Nos intervalos de $-2t$ até $2t$ a distribuição de estados das sub-bandas de helicidades $\nu = \pm$ são idênticas.

Os estudos recentes sobre as consequências da interação SO num sistema quase-unidimensional [22] e unidimensional no estudo do efeito Kondo [14], foram desenvolvidas supondo uma aproximação quadrática nas relações de dispersão dos elétrons. Com a finalidade de comparar estes resultados com os nossos resultados exatos, fazemos uma expansão em séries de Taylor de (4-21) na vizinhança de $k = 0$ para a borda inferior e em $k = \pm\pi$ para a borda superior da relação de dispersão.

Então, a expansão em série de Taylor da relação de dispersão (4-21) na vizinhança de $k = 0$ é,

$$\epsilon_{l(k)}^{\nu} = 2 \left(-t + \nu a |\gamma| |k| + t a^2 k^2 / 2 \right), \quad (4-30)$$

assim como também em torno de $k = \pm\pi$ é,

$$\epsilon_{l(k)}^{\nu} = 2 \left(t + \nu |\gamma| a(k - \pi) - ta^2(k - \pi)^2/2 \right) \quad k \geq 0, \quad (4-31)$$

$$\epsilon_{l(k)}^{\nu} = 2 \left(t - \nu |\gamma| a(k + \pi) - ta^2(k + \pi)^2/2 \right) \quad k \leq 0. \quad (4-32)$$

No espaço recíproco, a expansão da relação de dispersão 4-21 em $k = 0$ e $k = \pm\pi$, correspondem ao centro e à borda da primeira zona de Brillouin respectivamente. Esta expansão, produz uma largura de banda limitada pela sub-banda $\epsilon_{l(k_{max})}^+$ na borda superior e por $\epsilon_{l(k_{min})}^-$ na borda inferior, onde $k_{max} = \frac{1}{a}(\mp\pi \pm \frac{|\gamma|}{t})$ e $k_{min} = \pm \frac{|\gamma|}{t} \frac{1}{a}$, com a energia máxima e mínima da relação de dispersão aproximada dada por,

$$\epsilon_{l(k_{max})}^+ = 2|z| + \frac{(|z| - t)^2}{t} \quad (4-33)$$

$$\epsilon_{l(k_{min})}^- = -2|z| - \frac{(|z| - t)^2}{t}, \quad (4-34)$$

dado que a intensidade de interação SO $|\gamma|$, é pequena com relação ao termo de hopping t , com a relação $\frac{|\gamma|}{t} \ll 1$, o parâmetro $|z|$ pode ser expressado em séries de Taylor,

$$|z| = t + \frac{1}{2} \frac{|\gamma|^2}{t}, \quad (4-35)$$

substituindo (4-35) em (4-34) e (4-33), os limites da banda aproximada são:

$$\epsilon_{l(k_{max})}^+ = 2|z| + \frac{1}{4} \frac{|\gamma|^4}{t^3} \quad (4-36)$$

$$\epsilon_{l(k_{min})}^- = -2|z| - \frac{1}{4} \frac{|\gamma|^4}{t^3}. \quad (4-37)$$

Considerando o termo até a primeira ordem da expansão de $|z|$, obtemos os termos adicionais $\frac{1}{4} \frac{|\gamma|^4}{t^3}$ nos limites da banda aproximada, que são os erros introduzidos na expressão expandida com respeito à expressão exata (4-21), tal como mostra o gráfico.

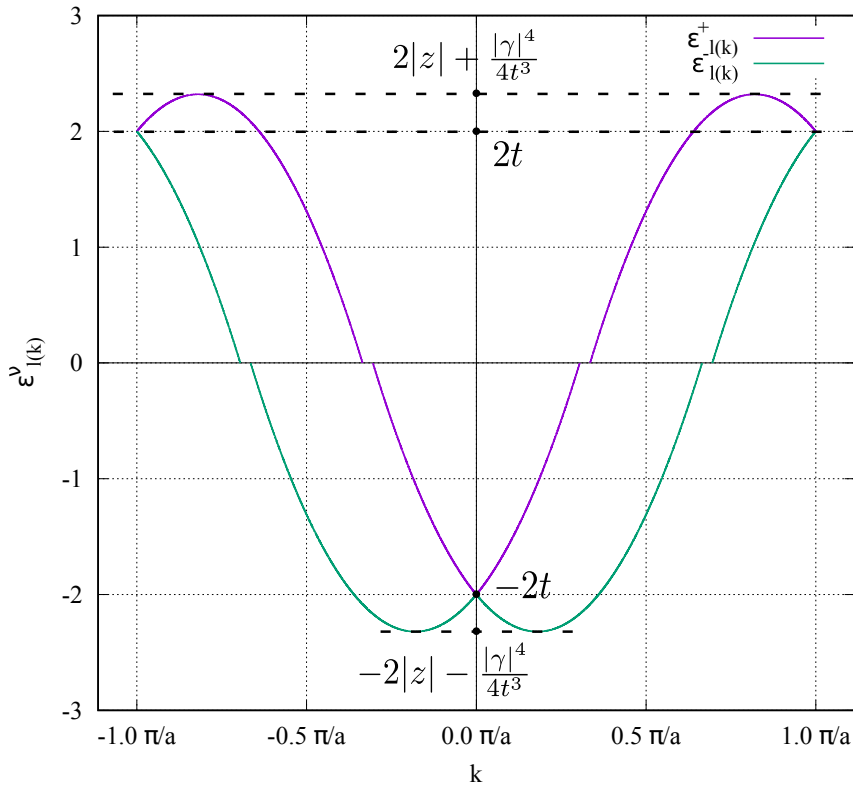


Figura 4.5: Relação de dispersão na aproximação quadrática. Por abaixo do nível de Fermi ($\epsilon_F = 0$) a energia é descrita pela relação de dispersão expandida na vizinhança de $k = 0$ e por acima do nível de Fermi pela relação de dispersão expandida na vizinhança de $k = \mp\pi$. As intensidades da interação SO $\alpha = \beta = 0.4$.

A expressão (4-30) é equivalente à relação de dispersão dada em [22], obtida mediante um tratamento perturbativo na suposição de uma interação SO fraca. No gráfico 4.5, os valores destacáveis de k são aqueles que estão na vizinhança do centro e na fronteira da primeira zona de Brillouin.

A densidade de estados na aproximação quadrática pode ser obtida de forma análoga à obtida para a relação de dispersão exata (ver apêndice A.3). Por conseguinte, as densidades nas regiões próximas de $k = 0$ são:

$$\rho_{l(\omega)}^+ = \begin{cases} 0, & -2|z| - \frac{|\gamma|^4}{4t^3} \leq \omega < -2t \\ \frac{1}{2\pi\sqrt{|z|^2+t(t+\omega)}}, & -2t \leq \omega \leq 0, \end{cases} \quad (4-38)$$

$$\rho_{l(\omega)}^- = \begin{cases} \frac{2}{2\pi\sqrt{|z|^2+t(t+\omega)}}, & -2|z| - \frac{|\gamma|^4}{4t^3} < \omega \leq -2t \\ \frac{1}{2\pi\sqrt{|z|^2+t(t+\omega)}}, & -2t < \omega \leq 0. \end{cases} \quad (4-39)$$

Como esperado, estas densidades apresentam a descontinuidade no valor $\omega = -2t$, o mesmo da descontinuidade da densidade exata, do gráfico 4.4. A contraparte correspondente à descontinuidade em $2t$ da densidade exata é

estudadas com a expansão em serie também na vizinhança $k = \pm\pi$. Operações algébricas análogas às já descritas, permitem obter a densidade de estados,

$$\rho_{l(\omega)}^+ = \begin{cases} \frac{1}{2\pi} \frac{2}{\sqrt{|z|^2+t(t-\omega)}}, & 2t \leq \omega \leq +2|z| + \frac{|z|^4}{4t^3} \\ \frac{1}{2\pi} \frac{1}{\sqrt{|z|^2+t(t-\omega)}}, & 0 \leq \omega < 2t. \end{cases} \quad (4-40)$$

$$\rho_{l(\omega)}^- = \begin{cases} 0, & 2t < \omega \leq 2|z| + \frac{|z|^4}{4t^3} \\ \frac{1}{2\pi} \frac{1}{\sqrt{|z|^2+t(t-\omega)}}, & 0 \leq \omega \leq 2t. \end{cases} \quad (4-41)$$

As regiões de validade das densidades de estados das relações de dispersão aproximada em relação das expressões exatas, pode ser visto no gráfico 4.6.

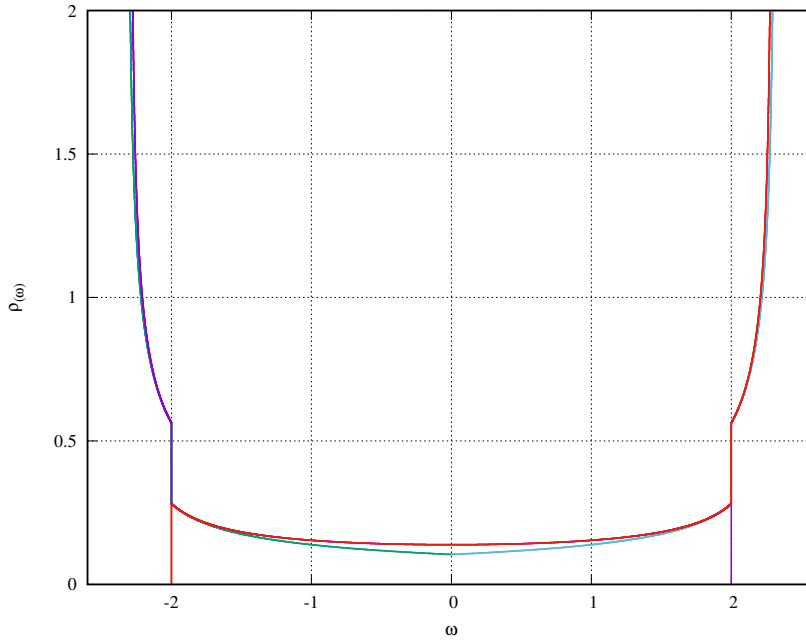


Figura 4.6: Densidade de estados exata curvas da cor vermelha e violeta, e densidade de estados na aproximação quadrática curvas da cor verde e azul com a intensidade da interação SO, $\alpha = \beta = 0.4$.

A figura mostra que, nas proximidades da borda $2t$, as densidade de estados exata e aproximada são muito próximas, mas, na região central da banda $\omega = 0$, eles têm uma diferença maior.

Pode-se ver que, a relação de dispersão na aproximação quadrática, adiciona um termo proporcional à quarta potencia da interação SO $\frac{|z|^4}{4t^3}$ sobre a largura da banda.

Embora a expansão em série de Taylor possa ser realizada na vizinhança de qualquer valor de momento k , como discutiremos nos próximos capítulos, as regiões onde $\rho_{l(\omega)}^+ \neq \rho_{l(\omega)}^-$ são as que realmente importam, já que é esta região que introduz a quebra da simetria $SU(2)$ no sistema na presença da interação spín-orbita.

Podemos dizer que a interação SO, introduz um erro que é proporcional à interação SO $\frac{|\gamma|^4}{4t^3}$, quando a aproximação é efetuada nas bordas da banda. Mas, nos resultados existentes até o momento em sistemas unidimensionais, esta aproximação quadrática é realizada nas vizinhanças do momento de Fermi k_F [14], que, indo para o espaço recíproco, o momento k_F está longe do centro e da borda.

5

Solução do problema pelo método de operadores de projeção

O método de operadores de projeção é uma das propostas mais recentes nas técnicas de soluções do Hamiltoniano da impureza de Anderson [23], que permite estudar as propriedades do estado fundamental como a susceptibilidade magnética e a temperatura Kondo em função dos parâmetros do sistema, mediante a renormalização funcional autoconsistente do Hamiltoniano.

Ele permite a solução do Hamiltoniano (4-16) mediante um sistema de equações de autoconsistência, que descreveremos em seguida.

5.1

Método de operadores de projeção

É um método que permite encontrar de forma não perturbativa a energia do estado fundamental de um sistema de muitos corpos.

Um sistema físico definido num espaço de Hilbert é representado por um operador H que satisfaz a equação de autovalores caracterizado por um auto-estado $|\Psi\rangle$. O espaço de Hilbert pode ser subdividido em dois ou mais subespaços linearmente independentes mediante operadores de projeção. Nosso interesse atual é obter dois subespaços com as seguintes características: um subespaço S_1 representado por um estado particular conhecido de um sistema de N partículas, e o subespaço S_2 contendo o resto dos estados possíveis desse sistema, de modo que, o espaço Hilbert resulta ser a soma dos dois subespaços.

Para tal efeito, escrevemos os operadores dados em [23], mas, com o mar de Fermi representado na base $|k\nu\rangle$ (número quântico do momento k e helicoidal ν). Definimos o subespaço S_1 , caracterizado pela função de onda $|\psi_1\rangle$

$$|\psi_1\rangle = \prod_{\epsilon_{(k)}^\nu \leq \epsilon_F} c_{k\nu}^\dagger |0\rangle, \quad (5-1)$$

que corresponde ao estado fundamental do mar de Fermi, onde ϵ_F é o nível de Fermi e $|0\rangle$ é o vácuo de partículas. O operador P_1 é tal que,

$$P_1|\psi_1\rangle \equiv |\psi_1\rangle \quad (5-2)$$

a operação (5-2) sobre um espaço definido na mesma base tem como autovalor 1, e o operador complementar a (5-2) é tal que satisfaz,

$$P_2 + P_1 = 1, \quad (5-3)$$

Os operadores P_1, P_2 , são definidos de modo que eles satisfaçam a propriedade de idempotência $P_1^2 = P_1, P_2^2 = P_2$, e os seus autovalores podem ser 1 quando atuam sobre o mesmo subespaço onde foram definidos, e 0 quando atuam sobre outros subespaços, assim por exemplo: se $|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle$ representam os estados do subespaço 1 e 2 do espaço de Hilbert.

$$\begin{aligned} P_1|\psi_1\rangle &= |\psi_1\rangle & P_1|\psi_2\rangle &= 0 \\ P_2|\psi_2\rangle &= |\psi_2\rangle & P_2|\psi_1\rangle &= 0. \end{aligned} \quad (5-4)$$

Quando P_1 atua sobre um estado arbitrário $|\Psi\rangle$ produz o estado particular conhecido $|\psi_1\rangle$ a menos de uma constante.

Os operadores de projeção permitem expressar o Hamiltoniano do sistema (4-18) como a soma dos Hamiltonianos dos subespaços S_1, S_2 , e as partes acopladas entre os dois subespaços.

Utilizando a relação (5-3) é possível obter:

$$H = (P_1 + P_2)H(P_1 + P_2) \quad (5-5)$$

$$H = H_{11} + H_{22} + H_{12} + H_{21}, \quad (5-6)$$

onde temos adotado a notação $H_{ij} = P_i H P_j$. Definimos a equação de autovalores do sistema como:

$$H|\psi\rangle = E|\psi\rangle. \quad (5-7)$$

A operação de P_1 sobre (5-7) projeta a equação do autovalores sobre o subespaço S_1 , que permite escrever, usando a identidade (5-3) e o fato que $P_i^2 = P_i$

$$P_1 H (P_1 + P_2) |\psi\rangle = E P_1 |\psi\rangle, \quad (5-8)$$

$$H_{11} P_1 |\psi\rangle + H_{12} P_2 |\psi\rangle = E P_1 |\psi\rangle. \quad (5-9)$$

Por outro lado, a projeção de (5-7) sobre o subespaço S_2 é

$$P_2 H (P_1 + P_2) |\psi\rangle = E P_2 |\psi\rangle, \quad (5-10)$$

$$(E - H_{22}) P_2 |\psi\rangle = H_{21} P_1 |\psi\rangle. \quad (5-11)$$

Na projeção da equação de autovalores sobre os espaços S_1 e S_2 usamos $H_{ij} P_i |\psi\rangle = 0$ e $H_{ij} P_j |\psi\rangle \neq 0$, de onde obtemos o sistema de equações em cada subespaço. Neste ponto, fica à nossa escolha obter $P_2 |\psi\rangle$ da expressão (5-11) e substituí-la na expressão (5-9), de onde obtemos a equação do autovalores definido no subespaço S_1 com o Hamiltoniano renormalizado,

$$(H_{11} + H_{12} \frac{1}{E - H_{22}} H_{21}) |\psi_1\rangle = E |\psi_1\rangle. \quad (5-12)$$

Este resultado nós permite encontrar os autovalores do Hamiltoniano H trabalhando no subespaço S_1 que é conhecido e com o Hamiltoniano renormalizado H_r ,

$$H_r = H_{11} + H_{12} \frac{1}{E - H_{22}} H_{21}, \quad (5-13)$$

A expressão (5-13) permite trabalhar num espaço unidimensional e obter os autovalores de E do sistema original. A dificuldade reside em que o Hamiltoniano renormalizado depende da própria energia a ser determinada, e que é necessário encontrar a inversa do operador resolvente $(E - H_{22})^{-1}$.

O Hamiltoniano renormalizado e o auto-estado do subespaço S_1 obedecem a equação de autovalores que resulta ser,

$$H_r |\psi_1\rangle = E |\psi_1\rangle. \quad (5-14)$$

5.2

Construção dos subespaços

O espaço S_1 é representado pelo estado $|\psi_1\rangle$ que corresponde ao estado fundamental do mar de Fermi e a impureza sem carga. O subespaço S_2 resulta estar composto por aqueles estados produzidos pelas excitações eletrônicas dos elétrons por baixo de ϵ_F à impureza, e desta, à banda de condução por acima de ϵ_F . Cada excitação envolve um par elétron-buraco.

Como já dissemos, o subespaço S_1 é de particular importância pelo fato que nele H_r é definido. Ele pode ser representado como na figura 5.1

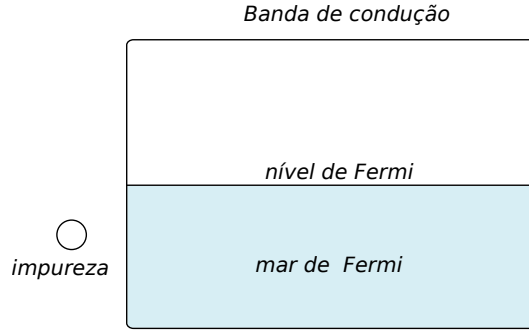


Figura 5.1: Representação esquemática do subespaço S_1

A figura 5.1, representa um sistema de N elétrons preenchida até o nível de Fermi com um nível de impureza desocupada.

O Hamiltoniano dado por H_{11} , descreve a energia dos elétrons de mar de Fermi,

$$H_{11} = \sum_{\epsilon_{(k)}^{\nu} \leq \epsilon_F} \epsilon_{(k)}^{\nu} c_{k\nu}^{\dagger} c_{k\nu}, \quad (5-15)$$

onde o somatório é sobre todas as energias $\epsilon_{(k)}^{\nu}$ por baixo do nível de Fermi. O Hamiltoniano H_{11} e o auto-estado $|\psi_1\rangle$ satisfazem a equação de autovalores,

$$H_{11}|\psi_1\rangle = \epsilon_T|\psi_1\rangle, \quad (5-16)$$

onde ϵ_T é a energia cinética dos elétrons de mar de Fermi $\epsilon_T = \sum_{\nu, \epsilon_k^{\nu} \leq \epsilon_F} \epsilon_{(k)}^{\nu}$.

Então, para calcular a energia do estado fundamental do sistema, efetuamos o produto $\langle\psi_1|$ pela esquerda sobre a equação de autovalores renormalizada (5-12), de onde resulta,

$$\Delta E = \sum_{k', k, \nu} \langle\phi_{kd}^{\nu}| \frac{\Gamma_k^{\nu} \Gamma_{k'}^{\nu*}}{E - H_{22}} |\phi_{k'd}^{\nu}\rangle. \quad (5-17)$$

Onde ΔE é a correção de energia do estados fundamental $|\psi_1\rangle$ é $\Delta E = E - \epsilon_T$. O estado $|\phi_{kd}^{\nu}\rangle$ caracteriza o estado do sistema de N elétrons, com um elétron na impureza de helicidade ν e um buraco na banda por baixo de ϵ_F de momento k e helicidade ν . Ele, é um dos N componentes da família de estados de $|\phi_1\rangle$ que pertence ao subespaço S_2 produzido por $H_{21}|\psi_1\rangle$ [24]. É possível demonstrar que no limite quando $U \rightarrow \infty$, na equação 5-17 é possível supor que $k = k'$ e ficar somente com as contribuições diagonais. Isto implica desprezar termos que são da ordem de $(\Gamma_k^{\nu}/D)^6$ cuja contribuição é desprezível para as situações físicas concretas. O módulo do parâmetro de acoplamento obtido a partir da definição (4-17) é $|\Gamma_k^{\nu}|^2 = V_k^2 + \delta^2|\gamma|^2$ que resulta ser independente da helicidade ν .

Portanto, a componente caracterizada por (k, ν) da família de estados $|\phi_1\rangle$ é definida como,

$$|\phi_{dk}^\nu\rangle = d^\dagger c_{k\nu} |\psi_1\rangle, \quad (5-18)$$

Pode-se perceber que a conexão entre os dois subespaços S_1, S_2 , é devido ao acoplamento das funções de onda dos elétrons no estado $|\psi_1\rangle$, com as funções de onda dos elétrons da primeira família de estados $|\phi_1\rangle$ de S_2 .

O subespaço S_2 é construído aplicando o Hamiltoniano (4-18) sobre a componente $|\phi_{dk}^\nu\rangle$ da primeira família de estados $|\phi_1\rangle$. O Hamiltoniano de acoplamento é o responsável de produzir uma componente da nova família de estados como segue,

$$H_c |\phi_{dk}^\nu\rangle = \sum_K \Gamma_K^{\nu*} c_{K\nu}^\dagger d_\nu |\phi_{dk}^\nu\rangle, \quad (5-19)$$

de onde surge a componente caracterizada pelos números quânticos $(k, \nu, K\nu)$ da segunda família de estados $|\phi_2\rangle$ dado por:

$$|\phi_{kK}^{\nu\nu}\rangle = c_{K\nu}^\dagger d_\nu |\phi_{dk}^\nu\rangle. \quad (5-20)$$

Aqui usamos a convenção de k, K e ν , para designar os elétrons com momento e helicidade por baixo e acima de ϵ_F (nível de Fermi) respectivamente, e (5-20) é uma das N componentes da segunda família de estados $|\phi_2\rangle$, Assim como na criação da primeira família de estados de S_2 , todas as componentes da família de estados de $|\phi_2\rangle$ representam o sistema com um buraco de momento k e helicidade ν e um elétron de momento K e helicidade ν . Nos processos da aplicação do Hamiltoniano H , só um dos termos do Hamiltoniano de acoplamento produz o estado adicional da nova família de estados.

Continuando com a construção de S_2 , aplicamos o Hamiltoniano H_c sobre a componente $|\phi_{kK}^{\nu\nu}\rangle$ da segunda família de estados que resulta,

$$H_c |\phi_{kK}^{\nu\nu}\rangle = \sum_{k', \nu'} \Gamma_{k'}^{\nu'} d_{\nu'}^\dagger c_{k'\nu'} |\phi_{kK}^{\nu\nu}\rangle, \quad (5-21)$$

de onde definimos a componente caracterizada pelos números quânticos $(k\nu, K\nu, k'\nu')$ da terceira família de estados $|\phi_3\rangle$ como,

$$|\phi_{kKk'd}^{\nu\nu\nu'}\rangle = c_{k'\nu'}^\dagger d_{\nu'} |\phi_{kK}^{\nu\nu}\rangle. \quad (5-22)$$

A componente $|\phi_{kKk'd}^{\nu\nu\nu'}\rangle$ representa o sistema com dois buracos caracterizados por $k\nu, k'\nu'$, e um elétron de helicidade ν' na impureza e outro de helicidade ν , e momento K por cima do nível de Fermi. Portanto, as componentes $|\phi_{kKk'd}^{\nu\nu\nu'}\rangle$ e $|\phi_{kd}^\nu\rangle$ representam estados do sistema com uma configuração de carga similar, a menos de uma par elétron-buraco de $|\phi_3\rangle$ com respeito a $|\phi_1\rangle$. Similarmente, para criar a componente da quarta família de estados, efetuamos a operação $H_c |\phi_{kKk'd}^{\nu\nu\nu'}\rangle$ o que produz a componente $|\phi_{kKk'K'}^{\nu\nu\nu'}\rangle$, que descreve o estado do sistema com uma configuração da carga

similar à componente $|\phi_{kK}^{\nu\nu}\rangle$ a menos de um par elétron-buraco. Desse modo, se continuarmos o processo de construção indefinidamente, podemos encontrar todas as componentes das famílias de estados que representam o sistema.

A construção do subespaço S_2 , é um processo de excitações eletrônicas desde a banda de condução por baixo de ϵ_F para o átomo de impureza e desta para acima de ϵ_F . Neste processo, poderíamos criar um outro elétron na impureza com a helicidade oposta ao primeiro, mas, estas transições são eliminadas do espaço de Hilbert pela suposição que a interação elétron-elétron na impureza seja infinita ($U = \infty$). Então, o processo repetitivo da criação S_2 , pode ser representado numa forma didática no esquema 5.2.

Pela semelhança de (4-18) ao Hamiltoniano de Anderson original, nestes processos de construção do subespaço S_2 , poderíamos pensar que os estados excitados são estados singletos como acontece quando se trabalha no espaço dos spins em ausência da interação SO [23]. Entretanto, isto só acontece quando os elementos Γ_k^ν da matriz de acoplamento (4-16) são reais e independentes do número quântico de helicidade. Este fato pode ser visto, aplicando o Hamiltoniano de acoplamento sobre o estado $|\psi_1\rangle$. Por exemplo, $H_c|\psi_1\rangle$ produz estados com coeficientes complexos diferentes.

$$\sum_{k\nu} \Gamma_k^\nu d_\nu^\dagger c_{k\nu} |\psi_1\rangle = \sum_k (\Gamma_k^+ d_+^\dagger c_{k+} + \Gamma_k^- d_-^\dagger c_{k-}) |\psi_1\rangle. \quad (5-23)$$

Segundo a definição dos elementos da matriz de acoplamento (4-17) $\Gamma_k^- = \Gamma_k^{+*}$. Esta é a causa fundamental pela qual os estados criados do subespaço S_2 não são estados singletos, como acontece em sistemas sem interação SO.

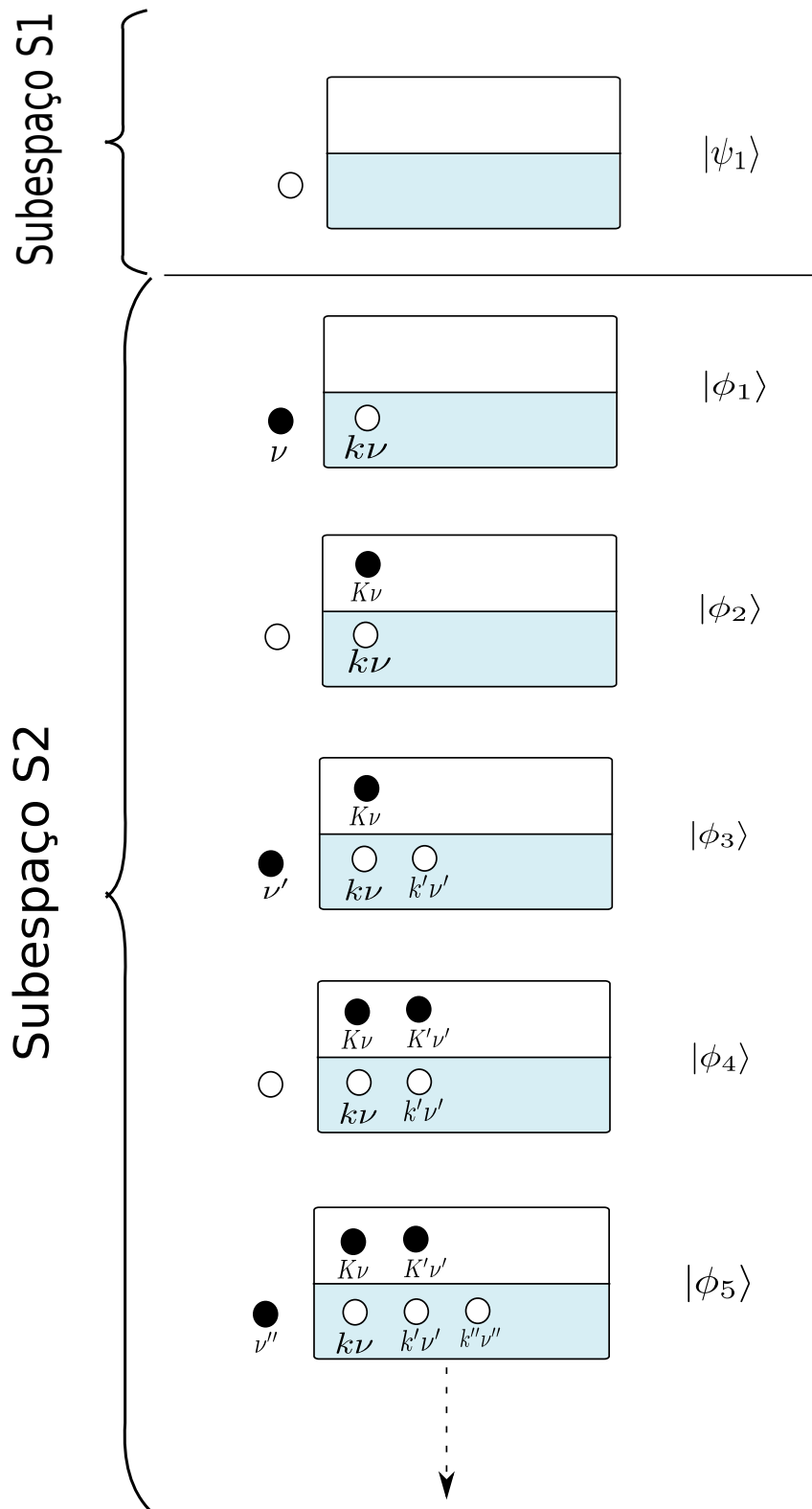


Figura 5.2: Construção do subespaço S_2 como uma aplicação sucessiva de H

O subespaço S_2 é uma construção hierárquica, ou seja, para criar a família de estados $|\phi_i\rangle$ necessariamente devemos ter criado a família do estado $|\phi_{i-1}\rangle$, assim como podemos ver no esquema 5.2.

5.3
Cálculo das funções autoconsistentes

Para determinar a energia do estado fundamental do sistema, devemos calcular os elementos da matriz do resolvente $(E - H_{22})^{-1}$ da equação (5-17) nos estados $|\phi_{kd}^\nu\rangle$ do subespaço S_2 . Ela pode ser obtida pelo método das funções de Green. Portanto definimos a função de Green como,

$$G_k^\nu = \langle \phi_{kd}^\nu | \frac{1}{E - H_{22}} | \phi_{kd}^\nu \rangle. \quad (5-24)$$

A função (5-24) pode ser obtida aplicando as equações de movimento para as funções de Green, Pela forma em que foi descrita anteriormente a geração S_2 pela sucessiva aplicação do Hamiltoniano sobre o estado $|\phi_{kd}^\nu\rangle$ é imediato perceber que a função procurada está definida numa rede de Bethe de coordenação infinita, esquema 5.3.

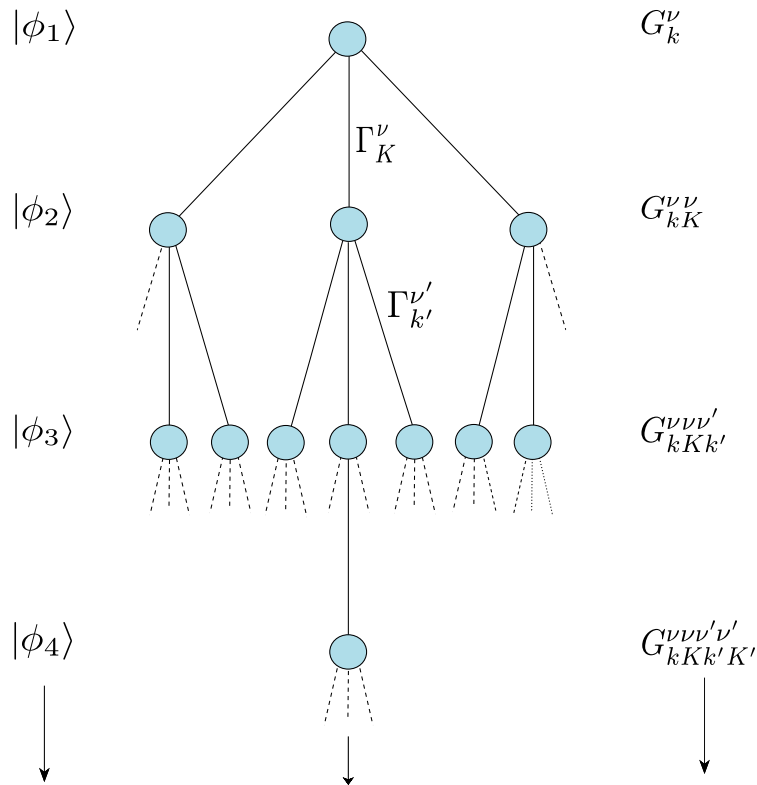


Figura 5.3: Representação hierárquica dos estados do subespaço S_2 como uma rede de Bethe infinita.

No esquema, se tivermos N partículas, teríamos uma rede de Bethe com $2N$ coordenadas incluindo os graus de liberdade de helicidade dos elétrons do mar de Fermi. Assim, na criação de cada componente de cada família de estados temos uma quantidade de $2N$ estados possíveis acessíveis.

Cada círculo em azul do esquema representa uma componente da família de estados $|\phi_i\rangle$ (i indica a i 'sima família de estados) acoplados pelo parâmetro Γ_k^ν de hibridização do Hamiltoniano de acoplamento (4-16).

Na figura 5.3 associamos uma função de Green a cada família de estados, com a finalidade de, a partir dela, obter a função de Green da família de estados $|\phi_1\rangle$, usando a equação de Dyson, $G = g + g\Gamma G'$.

$$G_k^\nu = g_k^\nu + g_k^\nu \sum_{K\nu} \Gamma_K^\nu G_{k,K}^{\nu\nu}, \quad (5-25)$$

$$G_{k,K}^{\nu\nu} = g_{k,K}^{\nu\nu} \left(\Gamma_K^{\nu*} G_k^\nu + \sum_{k'\nu'} \Gamma_{k'}^{\nu'} G_{k,K,k'}^{\nu\nu\nu'} \right), \quad (5-26)$$

$$G_{k,K,k}^{\nu\nu\nu'} = g_{k,K,k}^{\nu\nu\nu'} \left(\Gamma_{k'}^{\nu'} G_{k,K}^{\nu\nu} + \sum_{K'\nu'} \Gamma_{K'}^{\nu'} G_{k,K,k',K'}^{\nu\nu\nu'\nu'} \right), \quad (5-27)$$

$$\begin{aligned} G_{k,K,k',K'}^{\nu\nu\nu'\nu'} &= g_{k,K,k',K'}^{\nu\nu\nu'\nu'} \left(\Gamma_{K'}^{\nu'} G_{k,K,k}^{\nu\nu\nu'} + \dots \right) \\ \vdots &= \vdots \end{aligned} \quad (5-28)$$

Resolvendo o sistema das equações (5-28), (5-27), (5-26) e (5-25), temos a solução

$$G_k^\nu = \frac{1}{\frac{1}{g_k^\nu} - \sum_{K\nu} \Gamma_K^\nu \tilde{g}_{k,K}^{\nu\nu} \Gamma_K^{\nu*}}, \quad (5-29)$$

e com as definições

$$\tilde{g}_{k,K}^{\nu\nu} = \frac{1}{\frac{1}{g_{k,K}^{\nu\nu}} - \sum_{k'\nu'} \Gamma_{k'}^{\nu'} \tilde{g}_{k,K,k'}^{\nu\nu\nu'} \Gamma_{k'}^{\nu'*}}, \quad (5-30)$$

$$\tilde{g}_{k,K,k'}^{\nu\nu\nu'} = \frac{1}{\frac{1}{g_{k,K,k'}^{\nu,\nu,\nu'}} - \sum_{K'\nu'} \Gamma_{K'\nu'} \tilde{g}_{k,K,k',K'}^{\nu,\nu,\nu',\nu'} \Gamma_{K'}^{\nu'*}}, \quad (5-31)$$

onde g_k^ν , $g_{k,K}^{\nu,\nu}$, $g_{k,K,k'}^{\nu,\nu,\nu'}$, ... são as funções de Green da família de estados $|\phi_1\rangle$, $|\phi_2\rangle$, $|\phi_3\rangle$, ... sem interação, do subespaço S_2 .

A função de Green sem interação do sistema no estado $|\phi_{kd}^\nu\rangle$ pode ser escrita como:

$$g_k^\nu = \frac{1}{E - \epsilon_T - \epsilon_d + \epsilon_k^\nu}, \quad (5-32)$$

onde o ϵ_T como definido nos parágrafos anteriores é a energia dos elétrons do mar de Fermi, ϵ_d a energia do elétron com helicidade ν na impureza e ϵ_k^ν energia do buraco de momento k e de helicidade ν .

Similarmente obtemos a energia do sistema na segunda família de estados

$|\phi_2\rangle$, do sistema com um par de elétron-buraco de momento k, K e de helicidade ν ,

$$H_{22}^{(2)}|\phi_{kK}^{\nu\nu}\rangle = (\epsilon_T + \epsilon_K^\nu - \epsilon_k^\nu)|\phi_{kK}^{\nu\nu}\rangle, \quad (5-33)$$

com a função de Green sem interação deste estado

$$g_{k,K}^{\nu\nu} = \frac{1}{E - \epsilon_T - \epsilon_K^\nu + \epsilon_k^\nu}, \quad (5-34)$$

assim como também a energia dos estados de $|\phi_3\rangle$, estado com dois buracos na banda de energia por baixo de ϵ_F e um elétron na impureza com helicidade ν' e por cima de ϵ_F caracterizado pelos números quânticos do estado anterior,

$$H_{22}^3|\phi_{kKk'}^{\nu\nu\nu'}\rangle = (\epsilon_T - \epsilon_k^\nu + \epsilon_K^\nu + \epsilon_d - \epsilon_{k'}^{\nu'})|\phi_{kKk'}^{\nu\nu\nu'}\rangle, \quad (5-35)$$

$$g_{k,K,k'}^{\nu\nu\nu'} = \frac{1}{E - \epsilon_T + \epsilon_k^\nu - \epsilon_K^\nu - \epsilon_d + \epsilon_{k'}^{\nu'}}. \quad (5-36)$$

Desta forma podemos obter as funções de Green sem interação de toda a família de estados do subespaço S_2 , e substituí-las em (5-30), de onde reescrevemos explicitamente (5-29) como função da energia,

$$G_k^\nu = \frac{1}{\Delta E - \epsilon_d + \epsilon_k^\nu - \sum_{K,\nu'} \frac{|\Gamma_K^\nu|^2}{\Delta E - \epsilon_K^\nu + \epsilon_k^\nu - \sum_{k',\nu'}' }}, \quad (5-37)$$

onde

$$\sum_{k',\nu'}' = \frac{|\Gamma_{k'}^{\nu'}|^2}{\Delta E - \epsilon_d + \epsilon_k^\nu - \epsilon_K^\nu + \epsilon_{k'}^{\nu'} - \sum_{K',\nu''} \frac{|\Gamma_{K'}^{\nu''}|^2}{\Delta E - \epsilon_{K'}^{\nu''} + \epsilon_k^\nu - \epsilon_{k'}^{\nu'} - \sum_{k'',\nu'''}' }}, \quad (5-38)$$

Como o elemento da matriz do operador resolvente na expressão de energia (5-17) foi obtido mediante a função de Green (5-37), podemos expressar a equação de energia como,

$$\Delta E = \sum_{\nu,k \leq k_F} \langle \phi_{kd}^\nu | \Gamma_k^{\nu*} G_k^\nu \Gamma_k^\nu | \phi_{kd}^\nu \rangle \quad (5-39)$$

cuja forma explicita é:

$$\Delta E = \sum_{\nu,k \leq k_F} \frac{|\Gamma_k^\nu|^2}{\Delta E - \epsilon_d + \epsilon_k^\nu - \sum_{K \geq k_F} \frac{|\Gamma_K^\nu|^2}{\Delta E - \epsilon_K^\nu + \epsilon_k^\nu - \sum_{\nu',k' \leq k_F}' }}, \quad (5-40)$$

A última expressão é a correção de energia do sistema devido à interação da impureza com os contatos. O somatório principal de (5-40), é devido ao

primeiro buraco e elétron criado na banda de condução por baixo de ϵ_F e a impureza respectivamente. Que, por sua vez, leva em conta a correção devido à criação do elétron na banda de condução por cima de ϵ_F e a aniquilação do elétron de impureza, dada por $\sum_{K,\nu}$.

Desta forma, a sequência de correções de energia de elétrons de condução é devido à criação da nova família de estados. No limite termodinâmico $N \rightarrow \infty$, todas as contribuições devido à criação de um elétron e um buraco na impureza e na banda de condução respectivamente por baixo de ϵ_F são iguais. Analogamente, às contribuições do processo de aniquilação e criação de um elétron na impureza e na banda de condução por acima da ϵ_F respectivamente são iguais. Na síntese, as correções correspondentes às energias na construção do subespaço S_2 podem ser considerados semelhantes, o que permite que, num sistema de N partículas, as correções de energia das diferentes excitações eletrônicas possam ser escritos em termos de funções que satisfazem uma relação de autoconsistência [23]. Portanto é possível escrever a equação (5-40) como.

$$\Delta E = F_1(\Delta E) = \sum_{\nu} f_1^{\nu}(\Delta E). \quad (5-41)$$

Onde as funciones de autoconsistência são:

$$f_1^{\nu}(\Delta E) = \sum_{k \leq k_F} \frac{|\Gamma_k^{\nu}|^2}{\Delta E - \epsilon_d + \epsilon_k^{\nu} - F_0(\Delta E + \epsilon_k^{\nu})}, \quad (5-42)$$

$$F_0(\Delta E) = \sum_{K > k_F} \frac{|\Gamma_K^{\nu}|^2}{\Delta E - \epsilon_K^{\nu} - F_1(\Delta E - \epsilon_K^{\nu})}. \quad (5-43)$$

No limite termodinâmico a soma discreta dos momentos k são variáveis contínuas, de forma que os somatórios das equações acima são transformadas em integrados sobre a densidade de estados no espaço das energias, $\rho(\omega)$, onde $F_1(\Delta E)$ é calculado desde a borda inferior $-2|z|$ da banda até ϵ_F , enquanto $F_0(\Delta E)$ desde ϵ_F até o nível superior da banda $2|z|$.

Usando a equivalência $\sum_k = \frac{1}{2\pi} \int \rho(\omega) d\omega$, a forma integral das funções resulta ser:

$$f_1^{\nu}(\Delta E) = \frac{1}{2\pi} \int_{-2|z|}^{\epsilon_F} \frac{\rho(\omega) |\Gamma_k^{\nu}|^2}{\Delta E - \epsilon_d + \omega - F_0(\Delta E + \omega)} d\omega \quad (5-44)$$

$$F_0(\Delta E) = \frac{1}{2\pi} \int_{\epsilon_F}^{2|z|} \frac{\rho(\omega) |\Gamma_k^{\nu}|^2}{\Delta E + \omega - F_1(\Delta E + \omega)} d\omega. \quad (5-45)$$

Os parâmetros e a densidade de estados, são definidas no capítulo 4. A solução autoconsistente de (5-44) e (5-45) permite obter, através da equação (5-41), a energia do estado fundamental do sistema e todas as suas propriedades estáticas. A solução assim obtida será considerada no limite de $U = \infty$, como uma solução quase exata do problema.

Com a solução numérica das funções $f_1^\nu(\Delta E)$ e $f_0(\Delta E)$, determinamos ΔE , com o objetivo de determinar o número de ocupação do nível de impureza.

Derivando a função $f_1^\nu(\Delta E)$ com relação ao nível de impureza ϵ_d , determinamos o número de ocupação da carga $\langle n_{d\nu} \rangle$ no ponto quântico. O número de ocupação é

$$\langle n_{d\nu} \rangle = \frac{\partial}{\partial \epsilon_d} (f_1^\nu(\Delta E)). \quad (5-46)$$

A ocupação total do ponto quântico é dado como a soma $\langle n_d \rangle = \langle n_{d+} \rangle + \langle n_{d-} \rangle$. Calculamos $\langle n_{d+} \rangle$ e $\langle n_{d-} \rangle$ para determinar a região dos parâmetros onde o estado fundamental exibe a simetria $SU(2)$, ou seja $\langle n_{d+} \rangle = \langle n_{d-} \rangle$. As discussões destes resultados numéricos serão apresentados no seguinte capítulo.

6

Resultados e Conclusões

Resultados

Em princípio, a transformação (4-1), (4-2) permitiu diagonalizar o Hamiltoniano do sistema (4-18) como esperado. Como indicamos anteriormente, a densidade de estados depende do número quântico helicoidal ν . Portanto $\rho_{(\omega)}^- \neq \rho_{(\omega)}^+$, exceto no intervalo $(-2t, 2t)$, onde eles descrevem a mesma distribuição de estados eletrônicos, como mostra o gráfico 4.4. Neste intervalo sempre existem estados com momentos lineares k e k' que satisfazem $\epsilon_k^- = \epsilon_{k'}^+$.

Antes de entrar nas discussões dos resultados de forma detalhada, mencionamos que, nos cálculos numéricos temos usado como unidade de energia $\Delta = 1$ dada pela equação (2-4), e o nível da impureza ϵ_d durante o cálculo do programa e neste capítulo vamos renomeá-lo como potencial de porta V_g .

Resolvendo as equações integrais (5-44) e (5-45), determinamos a região onde a condição $\langle n_{d+} \rangle = \langle n_{d-} \rangle$ é satisfeita. Para isso, calculamos a variação do número de ocupação em função de V_g , tal como mostrado nos gráficos seguintes.

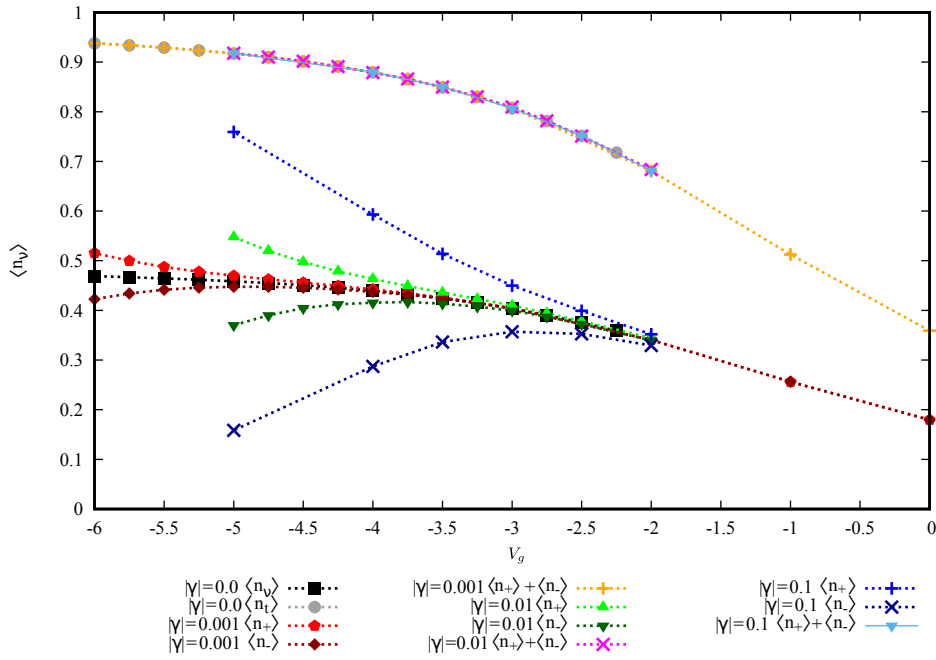


Figura 6.1: Número de ocupação total (curvas superpostas da parte superior), de helicidade positiva $\langle n_{d+} \rangle$ (as curvas da cor verde, vermelho e azul claros) e de helicidade negativa $\langle n_{d-} \rangle$ (as cores escuras) em função do potencial de porta V_g para diferentes valores da interação SO $|\gamma|$, para uma largura da banda $D = 20$

PUC-Rio - Certificação Digital Nº 1513200/CA

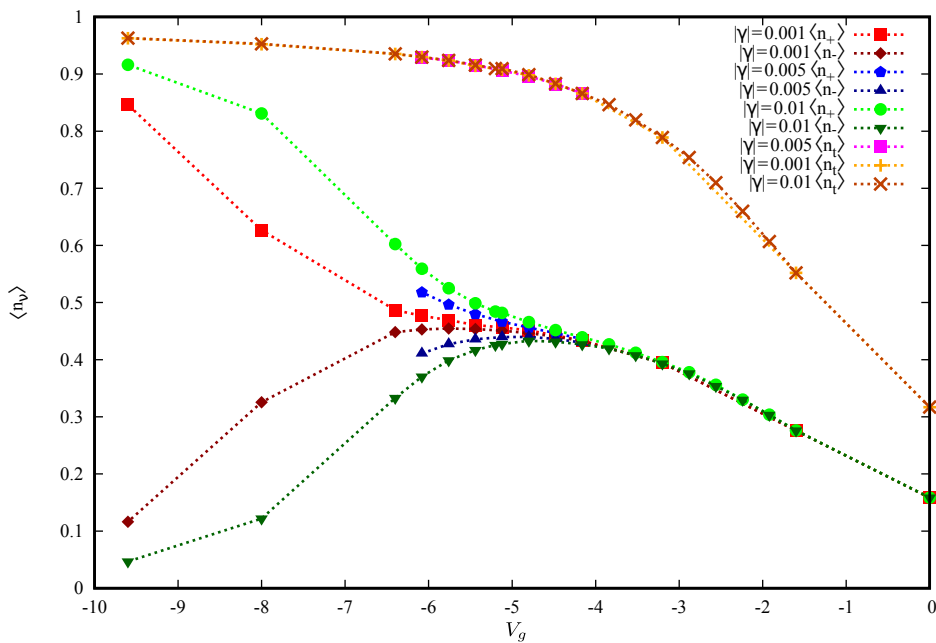


Figura 6.2: Igual à figura 6.1, para uma semi largura da banda de $D = 64$.

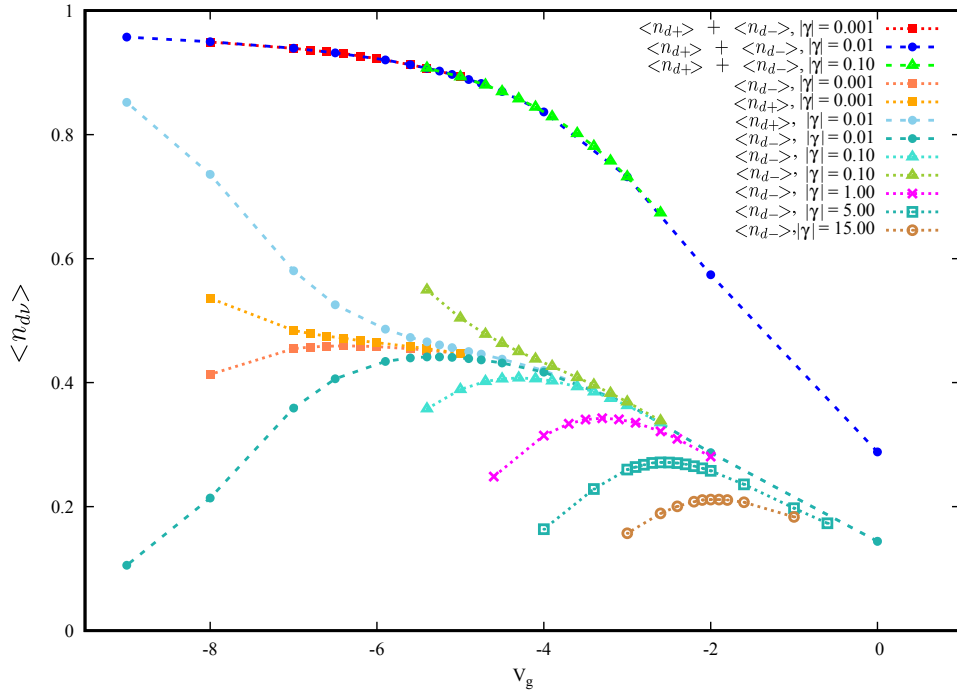


Figura 6.3: Número de ocupação para uma semi largura da banda $D = 150$ e com valores da interação SO diferentes.

Nos gráficos 6.1, 6.2 e 6.3 mostramos o comportamento do número de ocupação da impureza para larguras de banda diferentes. Para um valor fixo de $|\gamma|$ aumentamos a carga eletrônica do PQ reduzindo o potencial de porta V_g por baixo do ϵ_F . É possível observar a igualdade do número de ocupação ($\langle n_{d-} \rangle = \langle n_{d+} \rangle$) até um valor determinado de V_g , que caracterizamos como $V_{g,max}$ onde a grandeza n_- atinge o seu valor máximo. Este valor da figura não é exatamente aquele para a qual $\langle n_{d+} \rangle = \langle n_{d-} \rangle$, que acontece, como pode ser associado nas figuras para valores ligeiramente maiores do V_g . Entretanto ele define sem ambiguidades a região da fronteira na qual se produz que $\langle n_{d+} \rangle \neq \langle n_{d-} \rangle$. No intervalo $\epsilon_F > V_g > V_{g,max}$, a propriedade $\langle n_{d+} \rangle = \langle n_{d-} \rangle$ é aproximadamente preservada, mas, quando $V_g < V_{g,max}$ a igualdade das grandezas $\langle n_{d+} \rangle$ e $\langle n_{d-} \rangle$ não é mais mantida e, em consequência, a simetria $SU(2)$ do estado fundamental do sistema é quebrada no que diz respeito ao número de ocupação da impureza, assim como mostram as figuras. Identificamos este máximo como o ponto onde o sistema deixa de ter propriedades correspondentes ao efeito Kondo que requer $\langle n_{d+} \rangle = \langle n_{d-} \rangle$.

Chamamos o valor de $|\gamma|$ para a qual $\langle n_{d-} \rangle$ é máximo no valor de $V_{g,max}$ como $|\gamma|_{max}$, de tal forma que é possível definir a função $|\gamma|_{max} = f(V_{g,max})$.

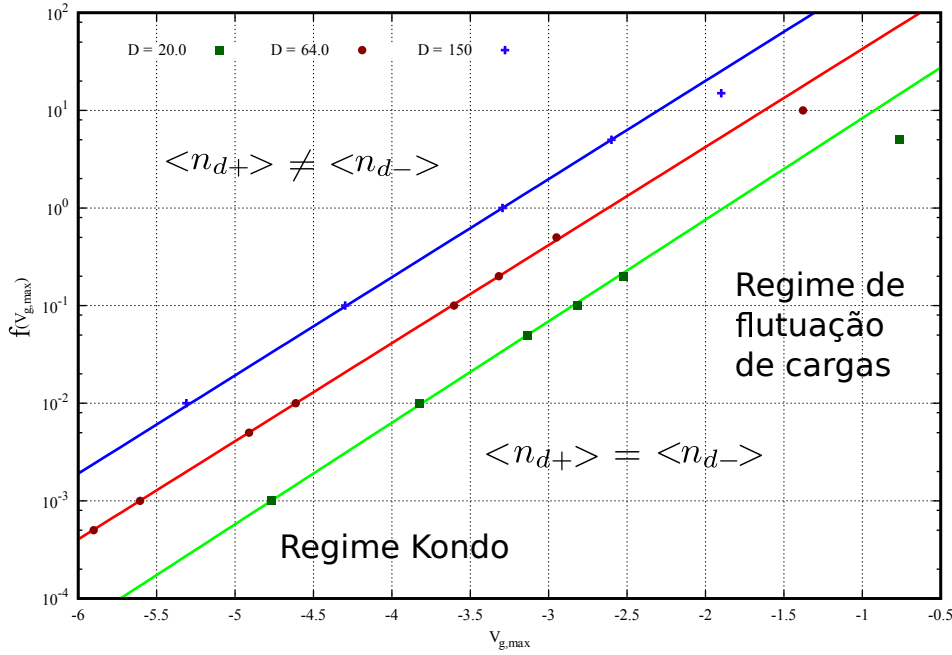


Figura 6.4: Acoplamento de SO em função do potencial de porta onde a ocupação $\langle n_{d-} \rangle$ é máxima para diferentes valores da largura da banda $2D$.

Identificamos que a função $f(V_{g,max})$ tem um comportamento universal de natureza exponencial semelhante a da própria temperatura Kondo T_k , como mostram as retas do gráfico 6.4 representada na escala logarítmica para três valores diferentes da largura de banda $2D$. O comportamento universal existe até um valor determinado do potencial de porta $V_{g,max}$ como mostram as retas. Quando $V_{g,max}$ está próximo do nível de Fermi, o comportamento desaparece já que o sistema entra no regime de flutuação de carga, fora do regime Kondo.

Na figura 6.4, as três retas apresentam um comportamento exponencial da interação SO em função do potencial de porta que corresponde ao máximo de $\langle n_{d-} \rangle$. Estas retas, estabelecem uma fronteira do regime Kondo para uma largura da banda determinada, na qual, para os valores dos parâmetros por baixo da reta, o sistema apresenta efeito Kondo, mas, para os valores por acima o efeito Kondo desaparece. A fronteira, estabelece a equiparação entre a energia ganha pelo estado fundamental ao adotar uma solução Kondo ($\langle n_{d+} \rangle = \langle n_{d-} \rangle$) e a energia implícita na interação SO que tende a garantir $\langle n_{d-} \rangle < \langle n_{d+} \rangle$.

Outra característica importante mostrada no gráfico 6.4 é que, a medida que a largura da banda diminui, a região do regime Kondo também diminui como pode-se observar comparando as retas da cor azul ($D = 150$), vermelha ($D = 64$) e a reta da cor verde ($D = 20$). Cada largura da banda define uma região no espaço dos parâmetros na qual o efeito Kondo se manifesta nas

propriedades do estado fundamental conservando a solução ($\langle n_{d+} = \langle n_{d-} \rangle$), embora o Hamiltoniano não possua a simetria $SU(2)$.

Vamos caracterizar a função $f(V_{g,max})$ do gráfico 6.4, como uma função universal dentro de uma faixa de parâmetros que estabelece uma fronteira tal que para $\gamma < \gamma_{max}$, o sistema possui as propriedades do efeito Kondo. Então, definimos a expressão geral de natureza exponencial como,

$$f(V_{g,max}) = g(D)e^{\lambda V_g}. \quad (6-1)$$

Onde supomos que $g(D)$ é uma função que depende da semi largura da banda D , como podemos ver na figura 6.5. Os valores obtidos desta função e da constante λ são obtidos do ajuste logarítmico do parâmetro do acoplamento da interação SO como função de $V_{g,max}$ da figura 6.4.

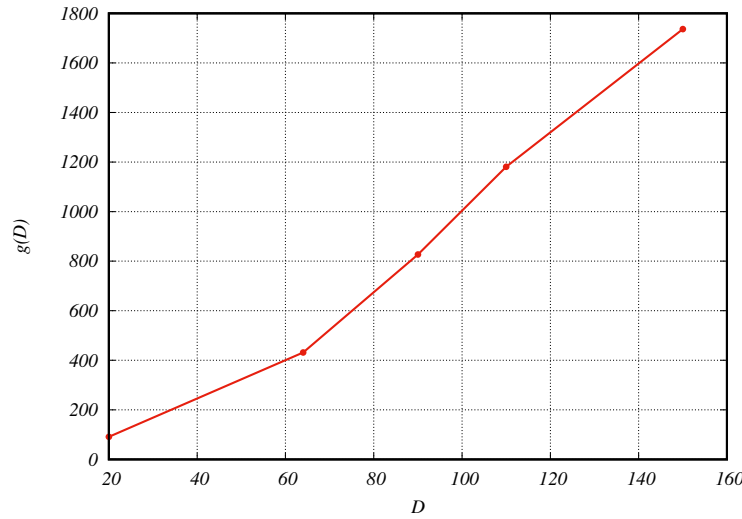


Figura 6.5: Comportamento da função coeficiente $g(D)$ como função de D

A função $g(D)$ é uma função crescente com a semi largura da banda, o que expressa o fato que a diferença entre $\rho_{(\omega)}^+$ e $\rho_{(\omega)}^-$ que acontece para $\omega < -2t$ e $\omega > 2t$ se produz numa região mais afastada do nível de Fermi $\epsilon_F = 0$ e como consequência a interação spin-orbita, representada pelo parâmetro γ , precisa ser maior para destruir o efeito Kondo.

Como conclusão deste capítulo podemos afirmar que sempre existirá uma região no espaço dos parâmetros onde a interação SO poderá existir com o regime Kondo e outra onde a interação SO seria o fenômeno dominante. A fronteira entre estas duas como evidenciado na figura tem uma caráter universal fora da região de flutuação de carga.

Conclusões

O Hamiltoniano de Anderson na presença da interação SO, foi diagonalizado completamente mediante uma transformação da sua base de representação.

O Hamiltoniano no espaço transformado, descreve um sistema análogo à impureza de Anderson no espaço dos spins, mas, os elementos diagonais do mar de Fermi dependem da helicidade ν , resultando $\epsilon_{(k)}^\nu \neq \epsilon_{(k)}^{\bar{\nu}}$ e como consequência $\rho_{(\omega)}^\nu \neq \rho_{(\omega)}^{\bar{\nu}}$.

Também foi possível mostrar que, o estado fundamental do sistema pode manter a igualdade da ocupação ($\langle n_{d-} \rangle = \langle n_{d+} \rangle$) dos dois estados caracterizados pelos números quânticos de helicidade ν . Como foi mostrado na figura 6.4, esta propriedade do estado fundamental existe, como um fenômeno emergente, em determinadas regiões do espaço dos parâmetros, definidos pelas retas da figura mencionada. Nesta região o sistema se comporta assumindo as características do regime Kondo.

Uma propriedade fundamental deste regime, a sua temperatura Kondo T_k não foi calculado.

Perspectivas

Uma perspectiva do trabalho para o futuro, consiste na obtenção da temperatura Kondo T_k , uma grandeza necessária para caracterizar completamente o estado fundamental do sistema. Isto pode ser conseguido obtendo a susceptibilidade magnética já que a temperatura Kondo ficaria determinada, porque T_k é proporcional ao inverso da susceptibilidade.

$$T_k \propto \frac{1}{\chi}. \quad (6-2)$$

A susceptibilidade magnética pode ser obtida estudando a resposta do sistema a um campo magnético externo através do efeito Zeeman que produz sobre a impureza. A magnetização pode ser obtida como a derivada

$$M = \frac{\partial}{\partial B} (\Delta E). \quad (6-3)$$

E a derivada da magnetização permite obter a susceptibilidade

$$\chi = \frac{\partial}{\partial B} M, \quad (6-4)$$

de onde a T_k pode ser calculada [3]. O estudo da T_k seria uma extensão natural dos resultados obtidos nesta dissertação.

A

Anexo I: Mudança da base de representação do Hamiltoniano do sistema

Neste anexo, apresentamos alguns detalhes das contas efetuadas no processo de transformação do Hamiltoniano do sistema. Começamos efetuando os produtos da tipo $c_{k\uparrow}^\dagger c_{k\uparrow}$, $c_{k\downarrow}^\dagger c_{k\downarrow}$, $c_{k\uparrow}^\dagger c_{k\downarrow}$, $c_{k\downarrow}^\dagger c_{k\uparrow}$, assim como também os produtos dos operadores do mar de Fermi com os operadores da impureza $c_{k\uparrow}^\dagger d_\uparrow$, $c_{k\uparrow}^\dagger c_{k\downarrow}$, $d_\uparrow^\dagger c_{k\uparrow}$, $d_\downarrow^\dagger c_{k\uparrow}$ e todos os produtos combinados que aparecem nos Hamiltonianos da impureza, mar de Fermi e o Hamiltoniano de acoplamento. E na segunda parte descrevemos alguns procedimentos das contas, afim que a transformação fique o mais explicito possível.

A.1

Relação dos operadores

Mudamos a base da representação do Hamiltoniano (3-8), com a finalidade de diagonalizar, operando as transformações dos operadores (4-1), (4-2) do mar de Fermi e da impureza.

$$\begin{aligned} c_{k\uparrow}^\dagger c_{k\uparrow} &= \frac{1}{2} \{ c_{k+}^\dagger c_{k+} + ie^{i\theta} c_{k+}^\dagger c_{k-} - ie^{-i\theta} c_{k-}^\dagger c_{k+} + c_{k-}^\dagger c_{k-} \} \\ c_{k\downarrow}^\dagger c_{k\downarrow} &= \frac{1}{2} \{ c_{k+}^\dagger c_{k+} - ie^{i\theta} c_{k+}^\dagger c_{k-} + ie^{-i\theta} c_{k-}^\dagger c_{k+} + c_{k-}^\dagger c_{k-} \} \end{aligned} \quad (\text{A-1})$$

$$\begin{aligned} c_{k\uparrow}^\dagger c_{k\downarrow} &= \frac{1}{2} \{ e^{-i\theta} c_{k+}^\dagger c_{k+} + e^{-i\theta} (-ie^{i\theta} c_{k+}^\dagger c_{k-} - ie^{-i\theta} c_{k-}^\dagger c_{k+}) - e^{-i\theta} c_{k-}^\dagger c_{k-} \} \\ c_{k\downarrow}^\dagger c_{k\uparrow} &= \frac{1}{2} \{ e^{i\theta} c_{k+}^\dagger c_{k+} + e^{i\theta} (ie^{i\theta} c_{k+}^\dagger c_{k-} + ie^{-i\theta} c_{k-}^\dagger c_{k+}) - e^{i\theta} c_{k-}^\dagger c_{k-} \}. \end{aligned} \quad (\text{A-2})$$

Para os pares de operadores dos elétrons na impureza resulta:

$$\begin{aligned} d_\uparrow^\dagger d_\uparrow &= \frac{1}{2} \{ d_+^\dagger d_{d+} + ie^{i\theta_d} d_+^\dagger d_- - ie^{-i\theta_d} d_-^\dagger d_+ + d_-^\dagger d_- \} \\ d_\downarrow^\dagger d_\downarrow &= \frac{1}{2} \{ d_+^\dagger d_+ - ie^{i\theta_d} d_+^\dagger d_- + ie^{-i\theta_d} d_-^\dagger d_+ + d_-^\dagger d_- \}. \end{aligned} \quad (\text{A-3})$$

Do termo que corresponde a pares de operadores, um da impureza e outro

do mar de Fermi, resultam:

$$\begin{aligned} c_{k\uparrow}^\dagger d_\uparrow &= \frac{1}{2} \left(c_{k+}^\dagger d_+ + i(e^{i\theta_a} c_{k+}^\dagger d_- - e^{i\theta} c_{k-}^\dagger d_+) + e^{-i(\theta-\theta_a)} c_{k-}^\dagger d_- \right) \\ c_{k\downarrow}^\dagger d_\downarrow &= \frac{1}{2} \left(e^{i(\theta-\theta_a)} c_{k+}^\dagger d_+ - i(e^{i\theta} c_{k+}^\dagger d_- - e^{i\theta_a} c_{k-}^\dagger d_+) + c_{k-}^\dagger d_- \right) \end{aligned} \quad (\text{A-4})$$

$$\begin{aligned} c_{k\uparrow}^\dagger d_\downarrow &= \frac{1}{2} \{ e^{-i\theta_a} c_{k+}^\dagger d_+ - i(c_{k+}^\dagger d_- + e^{-i(\theta+\theta_a)} c_{k-}^\dagger d_+) - e^{-i\theta} c_{k-}^\dagger d_- \} \\ c_{k\downarrow}^\dagger d_\uparrow &= \frac{1}{2} \{ e^{i\theta} c_{k+}^\dagger d_+ + i(e^{i(\theta-\theta_a)} c_{k+}^\dagger d_- + c_{k-}^\dagger d_+) - e^{-i\theta_a} c_{k-}^\dagger d_- \} \end{aligned} \quad (\text{A-5})$$

$$\begin{aligned} d_{\uparrow}^\dagger c_{k\downarrow} &= \frac{1}{2} \{ e^{-i\theta} d_+^\dagger c_{k+} - i(d_+^\dagger c_{k-} + e^{-i(\theta+\theta_a)} d_-^\dagger c_{k+}) - e^{-i\theta_a} d_-^\dagger c_{k-} \} \\ d_{\downarrow}^\dagger c_{k\uparrow} &= \frac{1}{2} \{ e^{i\theta_a} d_+^\dagger c_{k+} + i(e^{i(\theta+\theta_a)} d_+^\dagger c_{k-} + d_-^\dagger c_{k+}) - e^{i\theta} d_-^\dagger c_{k-} \}. \end{aligned} \quad (\text{A-6})$$

Substituindo as relações do par de operadores no Hamiltoniano do mar de Fermi (3-13), é possível escrever

$$\begin{aligned} H_{fm} &= \sum_k \left(\{ \epsilon_k - 2 \sin(ka) \frac{1}{2} ((\beta + i\alpha) e^{-i\theta} + (\beta - i\alpha) e^{i\theta}) \} c_{k+}^\dagger c_{k+} \right. \\ &\quad + \{ \epsilon_k + 2 \sin(ka) \frac{1}{2} ((\beta + i\alpha) e^{i\theta} + (\beta - i\alpha) e^{-i\theta}) \} c_{k-}^\dagger c_{k-} \\ &\quad - \{ \sin(ka) (-i(\beta + i\alpha) + i(\beta - i\alpha) e^{i2\theta}) \} c_{k+}^\dagger c_{k-} \\ &\quad \left. - \{ \sin(ka) (-i(\beta + i\alpha) e^{-i2\theta} + i(\beta - i\alpha)) \} c_{k-}^\dagger c_{k+} \right). \end{aligned} \quad (\text{A-7})$$

É evidente que para conseguir que o Hamiltoniano A-7 seja diagonal no número quântico $\nu = \pm$, a seguinte relação deve ser satisfeita.

$$\tan(\theta) = \frac{\alpha}{\beta} \quad (\text{A-8})$$

o que faz zero os dois termos não diagonais em ν no Hamiltoniano A-7.

Aplicamos agora a transformação 4-2 nos termos do Hamiltoniano que correspondem à impureza. É imediato concluir que o termo de um corpo fica invariante na nova base.

$$\sum_{\sigma} \epsilon_d n_{d\sigma} = \sum_{\nu} \epsilon_d n_{d\nu} \quad (\text{A-9})$$

Usando as propriedades de anticomutação dos operadores fermiônicos e pelo principio de exclusão de Pauli, é possível concluir que,

$$\begin{aligned}
 d_{\uparrow}^{\dagger}d_{\uparrow}d_{\downarrow}^{\dagger}d_{\downarrow} = & \frac{1}{4} \left(n_{d+} - ie^{i\theta_d}d_{+}^{\dagger}d_{+}d_{+}^{\dagger}d_{-} + ie^{-i\theta_d}d_{+}^{\dagger}d_{+}d_{-}^{\dagger}d_{+} + n_{d+}n_{d-} \right. \\
 & + ie^{i\theta_d}d_{+}^{\dagger}d_{-}d_{+}^{\dagger}d_{+} + e^{i2\theta_d}d_{+}^{\dagger}d_{-}d_{+}^{\dagger}d_{-} - d_{+}^{\dagger}d_{-}d_{-}^{\dagger}d_{+} + ie^{i\theta_d}d_{+}^{\dagger}d_{-}d_{-}^{\dagger}d_{-} \\
 & - ie^{-i\theta_d}d_{-}^{\dagger}d_{+}d_{+}^{\dagger}d_{+} - d_{-}^{\dagger}d_{+}d_{+}^{\dagger}d_{-} + e^{-i2\theta_d}d_{-}^{\dagger}d_{+}d_{-}^{\dagger}d_{+} - ie^{-i\theta_d}d_{-}^{\dagger}d_{-}d_{+}^{\dagger}d_{+} \\
 & \left. d_{-}^{\dagger}d_{-}d_{+}^{\dagger}d_{+} - ie^{\theta_d}d_{-}^{\dagger}d_{-}d_{+}^{\dagger}d_{-} + ie^{-i\theta_d}d_{-}^{\dagger}d_{-}d_{-}^{\dagger}d_{+} + n_{d-} \right). \tag{A-10}
 \end{aligned}$$

Na expressão (A-10), os produtos relevantes são aqueles termos onde aparece o par de operadores de cada helicidade, assim como o grupo $d_{+}^{\dagger}d_{+}d_{-}^{\dagger}d_{-}$, sem importar a ordem em que eles se encontram, enquanto os termos que não possuem o par de operadores são nulos pelo princípio de exclusão de Pauli e as regras de anticomutação.

De onde, o termo de muitos corpos permanece invariante frente a transformação.

$$Un_{d_{\uparrow}}n_{d_{\downarrow}} = Un_{d_{+}}n_{d_{-}} \tag{A-11}$$

Finalmente o Hamiltoniano de acoplamento devido à interação entre a impureza e o mar de Fermi (3-15) resulta.

$$\begin{aligned}
 H_c = & \sum_k \left(\frac{1}{2} \left\{ (V_k(1 + e^{i(\theta-\theta_d)}) + i(\beta_I + i\alpha_I)e^{-i\theta_d} + i(\beta_I - i\alpha_I)e^{i\theta}) \right\} c_{k+}^{\dagger}d_{+} \right. \\
 & + \frac{1}{2} \left\{ V_k(1 + e^{i(\theta_d-\theta)}) - i(\beta_I - i\alpha_I)e^{i\theta_d} - i(\beta_I + i\alpha_I)e^{-i\theta} \right\} d_{+}^{\dagger}c_{k+} \\
 & + \frac{1}{2} \left\{ V_k(e^{i(\theta_d-\theta)} + 1) + i\beta_I - i\alpha_I \right\} e^{i\theta} + i(\beta_I + i\alpha_I)e^{-i\theta_d} \left\} d_{-}^{\dagger}c_{k-} \right. \\
 & + \frac{1}{2} \left\{ V_k(e^{i(\theta_d-\theta)} + 1) - i(\beta_I + i\alpha_I)e^{-i\theta} - i(\beta_I - i\alpha_I)e^{i\theta_d} \right\} c_{k-}^{\dagger}d_{-} \\
 & + \frac{1}{2} \left\{ V_k(e^{i\theta_d} - e^{i\theta}) + (\beta_I + i\alpha_I) - (\beta_I - i\alpha_I)e^{i(\theta_d+\theta)} \right\} c_{k+}^{\dagger}d_{-} \\
 & + \frac{1}{2} \left\{ V_k(e^{-i\theta_d} - e^{-i\theta}) + (\beta_I + i\alpha_I)e^{-i(\theta+\theta_d)} - (\beta_I - i\alpha_I) \right\} c_{k-}^{\dagger}d_{+} \\
 & + \frac{1}{2} \left\{ iV_k(e^{i\theta} - e^{i\theta_d}) + (\beta_I - i\alpha_I)e^{i(\theta+\theta_d)} - (\beta_I + i\alpha_I) \right\} d_{+}^{\dagger}c_{k-} \\
 & \left. + \frac{1}{2} \left\{ iV_k(e^{-i\theta} - e^{-i\theta_d}) + (\beta_I - i\alpha_I) - (\beta_I + i\alpha_I)e^{-i(\theta+\theta_d)} \right\} d_{-}^{\dagger}c_{k+} \right). \tag{A-12}
 \end{aligned}$$

Para que este Hamiltoniano seja diagonal em ν é necessário impor uma condição sobre o ângulo θ_d que deve satisfazer:

$$e^{i\theta_d} = \frac{-iV_k e^{i\theta} + (\beta_I + i\alpha_I)}{-iV_k + (\beta_I - i\alpha_I)e^{i\theta}}. \tag{A-13}$$

Com esta condição o Hamiltoniano da interação da impureza com o mar de Fermi resulta:

$$\begin{aligned}
 H_c = \frac{1}{2} \sum_k & \left(\{V_k(1 + e^{i(\theta-\theta_d)}) + i(\beta_I + i\alpha_I)e^{-i\theta_d} + i(\beta_I - i\alpha_I)e^{i\theta}\} c_{k+}^\dagger d_+ \right. \\
 & V_k(e^{i(\theta_d-\theta)} + 1) - i(\beta_I + i\alpha_I)e^{-i\theta} - i(\beta_I - i\alpha_I)e^{i\theta_d}\} c_{k-}^\dagger d_- \\
 & V_k(1 + e^{i(\theta_d-\theta)}) - i(\beta_I - i\alpha_I)e^{i\theta_d} - i(\beta_I + i\alpha_I)e^{-i\theta}\} d_+^\dagger c_{k+} \\
 & \left. V_k(e^{i(\theta_d-\theta)} + 1) + i(\beta_I - i\alpha_I)e^{i\theta} + i(\beta_I + i\alpha_I)e^{-i\theta_d}\} d_-^\dagger c_{k-} \right). \tag{A-14}
 \end{aligned}$$

Definindo novos ângulos $\phi = \frac{\theta-\theta_d}{2}$, $\varphi = \frac{\theta+\theta_d}{2}$ tal que

$$\begin{aligned}
 H_c = \frac{1}{2} \sum_k & \left(\{2V_k e^{i\phi} \cos(\phi) + i e^{i\phi} (\beta_I \cos(\varphi) + \alpha_I \sin(\varphi))\} c_{k+}^\dagger d_+ \right. \\
 & + \{2V_k e^{-i\phi} \cos(\phi) - i e^{-i\phi} (\beta_I \cos(\varphi) + \alpha_I \sin(\varphi))\} c_{k-}^\dagger d_- \\
 & + \{2V_k e^{-i\phi} \cos(\phi) - i e^{-i\phi} (\beta_I \cos(\varphi) + \alpha_I \sin(\varphi))\} d_+^\dagger c_{k+} \\
 & \left. + \{2V_k e^{i\phi} \cos(\phi) + i e^{i\phi} (\beta_I \cos(\varphi) + \alpha_I \sin(\varphi))\} d_-^\dagger c_{k-} \right). \tag{A-15}
 \end{aligned}$$

Ademais, supondo que $\frac{\alpha_I}{\beta_I} = \frac{\alpha}{\beta}$ ou seja que $\beta_I = \delta\beta$ e $\alpha_I = \delta\alpha$, é possível mostrar da expressão (A-13) sabendo que $\frac{\alpha}{\beta} = \tan(\theta)$ que $\theta = \theta_d$, isto permite escrever a equação (A-15) de uma forma simplificada.

$$H_c = \sum_{k,\nu} (\Gamma_k^\nu c_{k\nu}^\dagger d_\nu + \Gamma_k^{\nu*} d_\nu^\dagger c_{k\nu}). \tag{A-16}$$

A quantidade Γ_k^ν resulta ser:

$$\Gamma_k^\nu = V_k + i\nu\delta|\gamma|, \tag{A-17}$$

e o modulo $|\gamma|$,

$$|\gamma| = \sqrt{\alpha^2 + \beta^2}. \tag{A-18}$$

A.2 Relação de dispersão

A relação de dispersão (4-8) obtida no espaço ν , permite escrever a densidade de estados ρ^ν numa forma similar à densidade de estados de uma cadeia linear.

O valor absoluto do seno da (4-8) pode ser escrito como,

$$|\sin(ka)| = \begin{cases} -\sin(ka); & k < 0 \\ \sin(ka); & k > 0, \end{cases} \tag{A-19}$$

e como consequência existe duas relações de dispersão

$$\epsilon_{(k)}^{\nu} = -2t \cos(ka) - \nu 2|\gamma| \sin(ka); \quad k < 0 \quad (\text{A-20})$$

$$\epsilon_{(k)}^{\nu} = -2t \cos(ka) + \nu 2|\gamma| \sin(ka); \quad k > 0. \quad (\text{A-21})$$

Considerarmos $\nu = \pm$ nas últimas expressões teríamos 4 relações de dispersão em total. Procedemos a reescrever o seno e o cosseno de (4-8) na sua representação exponencial,

$$\epsilon_{(k)<}^{\nu} = -2t \left(\frac{e^{ika} - e^{-ika}}{2} \right) - \nu 2|\gamma| \left(\frac{e^{ika} - e^{-ika}}{2i} \right) \quad (\text{A-22})$$

$$\epsilon_{(k)>}^{\nu} = -2t \left(\frac{e^{ika} - e^{-ika}}{2} \right) + \nu 2|\gamma| \left(\frac{e^{ika} - e^{-ika}}{2i} \right), \quad (\text{A-23})$$

onde $\epsilon_{(k)<}^{\nu}$, $\epsilon_{(k)>}^{\nu}$ representam a energia para valores de k menor e maior de zero respectivamente. Agrupando os termos comuns em relação às exponenciais de (A-22), resulta um coeficiente complexo que definimos como $z = t + \nu i|\gamma|$, correspondente à exponencial e^{-ika} , e o coeficiente conjugado z^* à e^{ika} . O coeficiente complexo é expressado na forma $z = |z|e^{i\nu\vartheta}$, com o seu argumento $\vartheta = \tan^{-1}(\frac{|\gamma|}{t})$, e da mesma forma o seu conjugado complexo z^* . Para a equação (A-23) condições similares podem ser obtidas.

$$\epsilon_{(k)<}^{\nu} = -2 \left(|z|e^{-i\nu\vartheta} e^{ika}/2 + |z|e^{i\nu\vartheta} e^{-ika}/2 \right) \quad (\text{A-24})$$

$$\epsilon_{(k)>}^{\nu} = -2 \left(|z|e^{i\nu\vartheta} e^{ika}/2 + |z|e^{-i\nu\vartheta} e^{-ika}/2 \right), \quad (\text{A-25})$$

de onde optemos a expressão desejada (4-8)

$$\epsilon_{(k)<}^{\nu} = -2|z| \cos(ka - \nu\vartheta) \quad (\text{A-26})$$

$$\epsilon_{(k)>}^{\nu} = -2|z| \cos(ka + \nu\vartheta). \quad (\text{A-27})$$

Este último resultado pode ser expressado na forma geral para todo k , fazendo que o argumento de z seja definido para cada região de k assim, $\vartheta_k = -\vartheta$ em $k < 0$, e $\vartheta_k = \vartheta$ quando $k > 0$,

$$\epsilon_{(k)}^{\nu} = -2|z| \cos(ka + \nu\vartheta_k). \quad (\text{A-28})$$

A.3

Densidade de estados

Vemos que a densidade de estados (4-22), no limite termodinâmico, é uma integral. Para aproveitar o gráfico 4.2, a forma integral da densidade no espaço k é,

$$\rho^+(\omega) = \frac{a}{\pi} \int_{k<0} \delta(\omega - \epsilon_{(k)}^+) dk + \frac{a}{\pi} \int_{k>0} \delta(\omega - \epsilon_{(k)}^+) dk, \quad (\text{A-29})$$

mas, é conveniente mudar a variável de integração k pela variável da energia no espaço das frequências. Para isso, derivamos (4-21),

$$dk = \frac{d\epsilon_k^+}{2a|z| \sin(ka + \vartheta_k)}. \quad (\text{A-30})$$

O termo do denominador, pode ser escrito em função da energia a partir de (4-21). Assim, $2a|z| \sin(ka + \vartheta_k) = a\sqrt{4|z|^2 - \epsilon_k^{+2}}$, de onde (A-30) resulta

$$dk = \frac{d\epsilon_k^+}{a\sqrt{4|z|^2 - \epsilon_k^{+2}}}. \quad (\text{A-31})$$

As energias para as k 's correspondentes aos limites são: $\epsilon_{(0)}^+ = -2t$, $\epsilon_{(\pm\pi)}^+ = 2t$ e $\epsilon_{(km)}^+ = 2|z|$, onde $km = (\mp\pi - \vartheta_k)/a$.

Substituindo dk em (A-31) e usando dx em vez de $d\epsilon_k^+$, nas integrais de (4-23) temos,

$$\rho_{(\omega)}^+ = \frac{1}{\pi} \int_{-2t}^{2t} \frac{\delta(\omega - x) dx}{\sqrt{4|z|^2 - x^2}} + \frac{2}{\pi} \int_{2t}^{2|z|} \frac{\delta(\omega - x) dx}{\sqrt{4|z|^2 - x^2}}. \quad (\text{A-32})$$

Considerando a largura total da banda de $-2|z|$ até $2|z|$, a densidade $\rho_{(\omega)}^+$ pode ser escrita,

$$\rho_{(\omega)}^+ = \begin{cases} \frac{2}{\pi\sqrt{4|z|^2 - \omega^2}}, & 2t \leq \omega \leq 2|z| \\ \frac{1}{\pi\sqrt{4|z|^2 - \omega^2}}, & -2t \leq \omega < 2t \\ 0, & -2|z| \leq \omega < -2t. \end{cases} \quad (\text{A-33})$$

Para a densidade de estados da sub-banda negativa o raciocínio é exatamente igual que para a sub-banda positiva, e pode ser obtida a partir da figura 4.3. Assim como para ϵ_k^+ separamos os intervalos de k . Desta forma é possível escrever $\rho^-(\omega)$

$$\rho_{(\omega)}^- = \begin{cases} 0, & 2t < \omega \leq 2|z| \\ \frac{1}{\pi\sqrt{4|z|^2 - \omega^2}}, & -2t < \omega \leq 2t \\ \frac{2}{\pi\sqrt{4|z|^2 - \omega^2}}, & -2|z| \leq \omega \leq -2t. \end{cases} \quad (\text{A-34})$$

Referências bibliográficas

- [1] REED, M. A.. **Quantum dots**. Scientific American, 268(1):118–123, 1993.
- [2] KOUWENHOVEN, L.. **Coupled quantum dots as artificial molecules**. Science, 268(5216):1440, 1995.
- [3] HEWSON, A. C.. **The Kondo problem to heavy fermions**, volumen 2. Cambridge university press, 1997.
- [4] SARACHIK, M.; CORENZWIT, E. ; LONGINOTTI, L.. **Resistivity of mo-nb and mo-re alloys containing 1% fe**. Physical Review, 135(4A):A1041, 1964.
- [5] PHILLIPS, P.. **Advanced solid state physics**. Cambridge University Press, 2012.
- [6] KOUWENHOVEN, L.; GLAZMAN, L.. **Revival of the kondo effect**. Physics world, 14(1):33, 2001.
- [7] KONDO, J.. **Resistance minimum in dilute magnetic alloys**. Progress of theoretical physics, 32(1):37–49, 1964.
- [8] GOLDHABER-GORDON, D.; SHTRIKMAN, H.; MAHALU, D.; ABUSCH-MAGDER, D.; MEIRAV, U. ; KASTNER, M.. **Kondo effect in a single-electron transistor**. Nature, 391(6663):156–159, 1998.
- [9] DATTA, S.; DAS, B.. **Electronic analog of the electro-optic modulator**. Applied Physics Letters, 56(7):665–667, 1990.
- [10] BONČA, J.; OTHERS. **Kondo effect in the presence of rashba spin-orbit interaction**. Physical Review B, 84(19):193411, 2011.
- [11] ZAREA, M.; ULLOA, S. E. ; SANDLER, N.. **Enhancement of the kondo effect through rashba spin-orbit interactions**. Physical review letters, 108(4):046601, 2012.
- [12] MALECKI, J.. **The two dimensional kondo model with rashba spin-orbit coupling**. Journal of Statistical Physics, 129(4):741–757, 2007.

- [13] MASTROGIUSEPPE, D.; WONG, A.; INGERSENT, K.; ULLOA, S. ; SANDLER, N.. **Kondo effect in graphene with rashba spin-orbit coupling**. Physical Review B, 90(3):035426, 2014.
- [14] DE SOUSA, G.; SILVA, J. F. ; VERNEK, E.. **Kondo effect in a quantum wire with spin-orbit coupling**. Physical Review B, 94(12):125115, 2016.
- [15] WONG, A.; ULLOA, S. E.; SANDLER, N. ; INGERSENT, K.. **Influence of rashba spin-orbit coupling on the kondo effect**. Physical Review B, 93(7):075148, 2016.
- [16] DRESSELHAUS, G.. **Spin-orbit coupling effects in zinc blende structures**. Physical Review, 100(2):580, 1955.
- [17] HORVATIĆ, B.; SOKCEVIĆ, D. ; ZLATIĆ, V.. **Finite-temperature spectral density for the anderson model**. Physical Review B, 36(1):675, 1987.
- [18] HALDANE, F.. **Scaling theory of the asymmetric anderson model**. Physical Review Letters, 40(6):416, 1978.
- [19] MEIR, Y.; WINGREEN, N. S.. **Spin-orbit scattering and the kondo effect**. Physical Review B, 50(7):4947, 1994.
- [20] DAVYDOV, A.. **Quantum mechanics**. International series of monographs in natural philosophy. Pergamon Press, 1965.
- [21] BYCHKOV, Y. A.; RASHBA, E.. **Properties of a 2d electron gas with lifted spectral degeneracy**. JETP lett, 39(2):78, 1984.
- [22] MIRELES, F.; KIRCZENOW, G.. **Ballistic spin-polarized transport and rashba spin precession in semiconductor nanowires**. Physical Review B, 64(2):024426, 2001.
- [23] ROURA-BAS, P.; HAMAD, I. ; ANDA, E.. **Ground state of the impurity anderson model revisited: A projector operator solution**. physica status solidi (b), 252(2):421–430, 2015.
- [24] HAMAD, I. J.; ROURA-BAS, P.; ALIGIA, A. A. ; ANDA, E. V.. **Self-consistent hybridization expansions for static properties of the anderson impurity model**. physica status solidi (b), 253(3):478–485, 2016.