

Referências Bibliográficas

- [1] H. C. Manoharan, C. P. Lutz, and D. M. Eigler. Quantum mirages formed by coherent projection of electronic structure. *Nature*, 40:512, 2000. (document), 1.3, 1.3, 1.6
- [2] J. Göres D. Goldhaber-Gordon and and M. A. Kastner. From the Kondo Regime to the Mixed-Valence Regime in a Single-Electron Transistor. *Phys. Rev. Lett.*, 81:5225, 1998. (document), 1.8
- [3] W. G. van der Wiel, S. De Franceschi, T. Fujisawa, S. Tarucha, and L. P. Kouwenhoven. The Kondo Effect in the Unitary Limit. *Science*, 289:2105, 2000. (document), 1.3, 1.10
- [4] E. Vernek, E. V. Anda, S. E. Ulloa, and N. Sandler. Phonon Rabi-assisted tunneling in diatomic molecules. *Phys. Rev. B*, 72:121405, 2005. (document), 3.1.2, 3.2, 3.7, 6
- [5] Antoine Georges and Y. Meir. Electronic Correlations in Transport through Coupled Quantum Dots. *Phys. Rev. Lett.*, 82:3508, 1999. (document), 1, 4.5.2, 4.4
- [6] M. Reed. Quantum dots. *Scientific American*, 268:118, 1993. 1
- [7] L. Kouwenhoven and C. Marcus. Quantum Dots. *Physics World*, 11:35, 1998. 1
- [8] S. Datta. *Electronic Transport in Mesoscopic Systems*. Cambridge University Press, 1995. 1
- [9] A. Mitra, I. Aleiner, and A. J. Millis. Phonon effects in molecular transistors: Quantal and classical treatment. *Phys. Rev. B*, 69(24):245302, 2004. 1, 1.4
- [10] L. Kouwenhoven and L. Glazman. Revival of the Kondo effect. 33, 2001. 1
- [11] Y. Meir, N. S Wingreen, and P. Lee. Low-temperature transport through a quantum dot - the Anderson model out of equilibrium. 70:2601, 1993. 1

- [12] A. C. Hewson. *The Kondo problem to heavy fermions*. Cambridge University Press, 1993. 1, 1.3, 1.3, 2.1, 2.2.1, B, B
- [13] D. Goldhaber-Gordon, H. Shtrikman, D. Mahalu, D. Abusch-Magder, U. Meirav, and M. A. Kastner. Kondo effect in a single-electron transistor. *Nature*, 391:156, 1998. 1
- [14] H. Jeong, A. M. Chang, and M. R. Melloch. The Kondo effect in an artificial quantum dot molecule. *Science*, 293:2221, 2001. 1, 1.3, 4.5, 4.5.2
- [15] C. A. Büsser, E. V. Anda, A. L. Lima, M. A. Davidovich, and G. Chiappe. Transport in coupled quantum dots: Kondo effect versus antiferromagnetic correlation. *Phys. Rev. B*, 62:9907, 2000. 1
- [16] T. Aono and M. Eto. Kondo resonant spectra in coupled quantum dots. *Phys. Rev. B*, 63:125327, 2001. 1
- [17] J. Maddox. Towards the Quantum Computer. *Nature*, 316:573, 1985. 1
- [18] C. H. Bennett and D. P. Divicenzo. Quantum Computing - Towards an Engeneering Era. *Nature*, 377:389, 1995. 1
- [19] I. L. Chuang and Y. Yamamoto. Simple Quantum Computer. *Phys. Rev. A*, 52:3489, 1995. 1
- [20] J. I. Heiblum, M. Yang, and H. Shtrikman. Transmission Phase of a Quantum Dot with Kondo Correlation near the Unitary Limit. 88:076601, 2002. 1
- [21] A. Yacoby, M. Heiblum, D. Mahalu, and H. Shtrikman. Coherence and Phase Sensitive Measurements in a Quantum Dot. 74:4047, 1995. 1
- [22] V. Ferrari, G. Chiappe, and E. V. Anda. Kondo Resonance Effect on Persistent Currents through a Quantum Dot in a Mesoscopic Ring. *Phys. Rev. Lett.*, 82:5088, 1999. 1, 1.3
- [23] R. Landauer and M. Büttiker. Resistance of Small Metallic Loops. 54:2052, 1985. 1
- [24] M. A. Castner J. H. F Scot-Thomas, S. B. Field. Conductance oscilations periodic in density of states of a one-dimensional electron gas. *Phys. Rev. Lett.*, 62:583, 1989. 1.2
- [25] U. Meirav, M. A. Castner, and S. J. Wind. Single-electron charging and periodic conductance resonances in GaAs nanostructures. *Phys. Rev. Lett.*, 65:771, 1990. 1.2

- [26] Y. Meir, N. S. Wingreen, and P. Lee. Transport through a strong interacting electron system: Theory of periodic conductance oscillations. *Phys. Rev. Lett.*, 66:3048, 1991. 1.2
- [27] P. W. Anderson. Localized Magnetic States in Metals. *Phys. Rev.*, 124(1):41–53, 1961. 1.2, 3.1
- [28] N. Y. Morgana, D. Abusch-Magder, and M. A. Kastner. Evidence for activated conduction in a single electron transistor. *J. of App. Phys.*, 89:410, 2001. 1.2
- [29] T. H. Chang, K. A. Chen, and C. H. Yang. Fabrication technique for nanometer-scale InAs quantum devices: Observation of quantum interference in Aharonov-Bohm rings and Coulomb blockade in quantum dots. *J. Vac. Sci. Technol. B*, 18:3493, 2000. 1.2
- [30] J. Kondo. Resistance Minimum in Dilute Magnetic Alloys. *Prog. of Theor. Phys.*, 32:37, 1964. 1.3, 2.2.2
- [31] M. P. Sarachik, E. Corenzwit, and L. D. Longinotti. Resistivity of Mo-Nb and Mo-Re Alloys Containing 1% Fe. *Phys. Rev.*, 135:A 1041, 1964. 1.3
- [32] G. A. Fiete and E. J. Heller. Colloquium: Theory of quantum corrals and quantum mirages. 75:933–948, 2003. 1.3, 2
- [33] S. Sasaki, S. De Franceschi, J. M. Elzerman, W. G. van der Wiel, S. Tarucha M. Eto, and L. P. Kouwenhoven. Kondo effect in an integer-spin quantum dot. *Nature*, 405:764, 2000. 1.3, 4.5
- [34] T. Inoshita. Condensed matter physics - Kondo effect in quantum dots. *Science*, 281:526–527, 1998. 1.3
- [35] S. M. Cronenwett, T. H. Oosterkamp, and L. P. Kouwenhoven. A tunable Kondo effect in quantum dots. *Science*, 281:540–544, 1998. 1.3
- [36] W. Izumida, O. Sakai, and Y. Shimizu. Kondo effects in quantum dots systems. *Physica B*, 261:215–216, 1999. 1.3
- [37] M. Pustilnik and L. I. Glazman. Kondo effect in real quantum dots. *Phys. Rev. Lett.*, 87:216601, 2001. 1.3
- [38] K. Kikoin and Y. Avishai. Kondo Tunneling through Real and Artificial Molecules. *Phys. Rev. Lett.*, 86(10):2090–2093, 2001. 1.3
- [39] W. J. Liang, M. P. Shores, and M. Bockrath. Kondo resonance in a single-molecule transistor. *Nature*, 417:725–729, 2002. 1.3

- [40] T. Kuzmenko, K. Kikoin, and Y. Avishai. Kondo effect in molecules with strong correlations. *Physica B-Cond. Matt.*, 359:1460–1462, 2005. 1.3
- [41] J. Park et al. Coulomb blockade and the Kondo effect in single-atom transistor. *Nature*, 417(6890):722, 2002. 1.3, 1.4
- [42] R. Franco, M.S. Figueira, and E. V. Anda. Lateral Fano resonances and Kondo effect in the strong coupling regime of a T-coupled quantum dot. *Phys. Rev. B*, 73:195305, 2006. 1.3
- [43] V. M. Apel. *Correlação Eletrônica em Sistemas de Pontos Quânticos*. PhD thesis, Pontifícia Universidade católica do Rio de Janeiro, 2004. 1.3
- [44] S. R. White. Density Matrix Formulation for Quantum Renormalization Groups. *Phys. Rev. Lett.*, 69:2863, 1992. 1.3, 1.3
- [45] E. V. Anda. In Preparation. 1.3
- [46] K. G. Wilson. The renormalization group: Critical phenomena and the Kondo problem. *Rev. Mod. Phys.*, 47:773, 1975. 1.3
- [47] M. A. Cazalilla and J. B. Marston. Time-Dependent Density-Matrix Renormalization Group: A Systematic Method for the Study of Quantum Many-Body Out-of-Equilibrium Systems. *Phys. Rev. Lett.*, 88:256403, 2002. 1.3
- [48] S. R. White and A. E. Feiguin. Real-Time Evolution Using the Density Matrix Renormalization Group. *Phys. Rev. Lett.*, 93:076401, 2004. 1.3
- [49] A. J. Daley, C. Kollath, and U. Cshollwöck. Time-dependent density-matrix renormalization-group using adaptive effective Hilbert spaces. *J. Stat. Mech.*, P04005, 2004. 1.3
- [50] S; W. Hwang J. H. Oh, D. Ahn D. Optically driven qubits in artificial molecules. *Phys. Rev. A*, 62:052306, 2000. 1.4
- [51] Ned S. Wingreen, Karsten W. Jacobsen, and John W. Wilkins. Inelastic scattering in resonant tunneling. *Phys. Rev. B*, 40(17):11834, 1989. 1.4, 1.4
- [52] Y. García, J. J. Palacios, E. San Fabián, J. A. Vergés, A. J. Pérez-Jiménez, and E. Louis. Electronic transport and vibrational modes in a small molecular bridge: H2 in Pt nanocontacts. *Phys. Rev. B*, 69(041402(R)), 2004. 1.4

- [53] B. C. Stipe, M. A. Rezaei, and W. Ho. Single Molecule Vibrational Spectroscopy and Mycroscopy. *Science*, 280:1732–1735, 1998. 1.4
- [54] T. Stauber, R. Zimmermann, and H. Castella. Electron-phonon interaction in quantum dots: A solvable model. *Phys. Rev. B*, 62(11):7336–7343, 2000. 1.4
- [55] David M.-T. Kuo and Y. C. Chang. Tunneling current through a quantum dot with strong electron-phonon interaction. 66:085311, 2002. 1.4
- [56] E. Vernek, E. V. Anda, S. Ulloa, and N. Sandler. Rattling chains. *Nature (Research Highlights)*, 437:430, 2005. 1.4, 5.1, 6
- [57] 7H. Park, J. Park, A. K. L. Lim, and P. L. McEuen. Nanomechanical oscillations in a single- C_{60} transistor p57. *Nature*, 407(6800):57, 2000. 1.4
- [58] K. Flensberg. Tunneling broadening of vibrational sidebands in molecular transistors. *Phys. Rev. B*, 68(20):205323, 2003. 1.4
- [59] M. I. Vasilevskiy, E. V. Anda, and S. S. Makler. Electron-phonon interaction effects in semiconductor quantum dots: A nonperturbative approach. *Physical Review B*, 70:035318, 2004. 1.4, 3, 3.1, 5.1.2
- [60] P. Orellana, E. Anda, and F. Claro. Dynamic Instabilities in Resonant Tunneling Induced by a Magnetic Field. *Phys. Rev. Lett.*, 79(6):1118–1121, 1997. 1.4
- [61] R. H. M. Smit, Y. Noat, C. Untiedt, N. D. Lang, M. C. van Hemert, and J. M. van Ruitenbeek. Measurement of the conductance of a hydrogen molecule. *Nature*, 419(6910):906, 2002. 1.4, 3
- [62] E. V. Anda and F. Flores. The role of inelastic scatering in resonant tunneling heterostructures. *Journal of Phys. Cond. Matt.*, 3:9087, 1991. 1.4
- [63] T. Tasai and M. Eto. Transport properties of quantum dots with strong electron-phonon. *Physica E*, 17:139, 2003. 1.4, 3.1.2, 6
- [64] J. W. Gadzuk and M. Plihal. Quantum mirages in scanning tunneling spectroscopy of Kondo adsorbates: Vibrational signatures. 68:235413, 2003. 2

- [65] M. A. Schneider, L. Vitali, and P. Wahl. Kondo state of Co impurities at noble metal surfaces. *App. Phys. A - Materials Science and Processing*, 80:937–941, 2005. 2
- [66] L. Limot and R. Berndt. Kondo effect and surface-state electrons. *App. Surface Science*, 237:576–580, 2004. 2
- [67] A. Lobos and A. A. Aligia. One- and many-body effects on mirages in quantum corrals. 68:035411, 2003. 2
- [68] A. Messiah. *Quantum Machanics*. North-Holand, Amsterdam, 1965. 2.1, 2.1
- [69] J. R. Schrieffer and P. A. Wolff. Relation between the Anderson and Kondo Hamiltonians. *Phys. Rev.*, 149:491, 1966. 2.2.2, B
- [70] C. Lacroix. Density of states for the Anderson model. *J. Phys. F: Metal Phys.*, 11:2389–2397, 1981. 2.2.2, 2.2.2, 2.2.2, 4.2
- [71] F. D. M. Haldane. Scaling Theory of the Asymmetric Anderson Model. *Phys. Rev. Lett.*, 40:416, 1978. 2.2.2
- [72] V. M. Apel. *Correlação Eletrônica em sistemas de pontos quânticos*. PhD thesis, Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro, 2004. 2.2.2
- [73] R. H. M. Smit, Y. Noat, C. Untiedt, M. C. Van Hermet, and J. M. Van Ruitenbeek. Measurement of the conductance of a hydrogen molecule. *Nature*, 419:906, 2002. 3
- [74] D. Djukic, K. S. Thygesen, and C. Untiedt. Stretching dependence of the vibration modes of a single-molecule Pt-H₂-Pt bridge. *Phys. Rev. B*, 71(16):161402(R), 2005. 3
- [75] H. Fröhlich, H. Pelzer, and S. Zireau. *Phylos. Mag.*, 41:221, 1950. 3.1
- [76] D. G. Mahan. *Many-Particle Physics*. McGraw-Hill, 1990. 3.1, A
- [77] G. D. Mahan. *Many-particle physics*. Kluwer Academic, New York, 2000. 3.1
- [78] P. Meystre and M. Sargent III. *Elements of Quantum Optics*. Springer-Verlag, Berlin, 1998. 3.1
- [79] D. N. Zubarev. Double-time Green functios in statistical physics. *Phys. Uspekhi*, 71(3):71–116, 1960. 3.1, A

- [80] L. P. Kadanoff and G. Baym. *Quantum Statistical Mechanics*. Benjamim, New York, 1962. 3.1.1, A
- [81] L. V. Keldysh. Diagram Technique for Nonequilibrium Processes. *Zh. Eksp. Teor. Fiz.*, 47:1515, 1964. 3.1.1, 4.5.1
- [82] J. H. Davies, S. Hershfield, and P. Hyldgaard. Time-Dependent Transport in Interacting and Non-Interacting Resonant Tunneling Systems. *Phys. Rev. B*, 50:5528, 1993. 3.1.1
- [83] S. Jorda. Theory os Rabi splitting in cavity-embedded quantum wells. *Phys. Rev. B*, 50:18960, 1994. 3.1.2
- [84] E. Leobandung, L. J. Guo, and S. Y. Choua. Single hole quantum dot transistors in silicon. *App. Phys. Lett.*, 67:2338, 1995. 4.1
- [85] Piers Coleman. $1/N$ expansion for the Kondo lattice. *Phys. Rev. B*, 28(8):5255, 1983. 4.1, 4.1.1
- [86] W. G. van der Wiel, S. De Franceschi, J. M. Elzerman, S. Tarucha, and L. P. Kouwenhoven. Electron transport through double quantum dots. *Review of Modern Physics*, 75:1, 2003. 4.5
- [87] P. S. Cornaglia and D. R. Grempel. Strongly correlated regimes in a double quantum dot device. *Phys. Rev. B*, 71:075305, 2005. 4.5
- [88] Bing Dong and X. L. Lei. Kondo effect and antiferromagnetic correlation in transport through tunneling-coupled double quantum dots. *Phys. Rev. B*, 65:241304(R), 2002. 4.5, 4.5.2
- [89] C. A. Büsser, G. B. Martins, and K. A. Al-Hassanieh. Interference effects in the conductance of multilevel quantum dots. *70:245303*, 2004. 4.5, 4.5.2
- [90] V. M. Apel, Maria A. Davidovich, and G. Chiappe. Phase effects on the conductance through parallel double dots. *Phys. Rev. B*, 72(12):125302, 2005. 4.5, 4.5.2
- [91] Myung-Hoon Chung. Triplet-singlet transition in a quantum dot with disorder. *Phys. Rev. B*, 70:113302, 2004. 4.5
- [92] E. Vernek, N. Sandler, S.E. Ulloa, and E.V. Anda. Kondo regime of a quantum dot molecule: A finite-U slave boson approach. *Physica E*, In Press, 2006. 4.5, 5.1
- [93] Guo-Hui Ding and Bing Dong. Persistent current in a mesoscopic ring coupled with a quantum dot. *Phys. Rev. B*, 67:195327, 2003. 4.5.2

- [94] Chul Koo Kim Guo-Hui Ding and Kyun Nahm. Fano resonance in electron transport through parallel double quantum dots in the Kondo regime. *Phys. Rev. B*, 71(20):205313, 2005. 4.5.2
- [95] A. L. Chudnovskiy and S. E. Ulloa. Kondo and mixed-valence regimes in multilevel quantum dots. *Phys. Rev. B*, 63(16):165316, 2001. 4.5.2, 4.5.2
- [96] T. V. Shahbazyan and S. E. Ulloa. Localized states in a strong magnetic field: Resonant scattering and the Dicke effect. *Phys. Rev. B*, 57(11):6642–6653, 1998. 4.5.2, 4.5.2
- [97] E. Vernek, E. V. Anda, S. E. Ulloa, and N. Sandler. Phonon Rabi-assisted tunneling regimes in diatomic molecules. *cond-mat/0701356 submitted to Phys. Rev. B*. 6
- [98] C. Zener. Interaction Between the d Shells in the Transition Metals. *Phys. Rev.*, 81:440, 1951. B
- [99] E. V. Anda. Green function solution for two hybridized electronic bands. *J. Phys. C: Solid State Phys.*, 14:1037, 1981. D, D

A

Método das funções de Green em sistemas de muitos corpos.

As funções de Green na Mecânica Estatística é uma generalização do conceito de funções de correlação. Elas permitem o cálculo dos valores esperados dos observáveis de um sistema físico. As funções de Green são de grande utilidade quando for possível formular e resolver as suas equações de movimento, tarefa essa que em geral não pode ser resolvida em forma exata. Na prática, os sistemas físicos de interesse constituídos de partículas interagentes não têm solução exata, o que nos restringe a resolver os problemas de maneira aproximada. Isso pode à primeira vista nos causar uma certa frustração, mas o fato é que podemos fazer aproximações de modo a simplificar o problema e ainda descrever razoavelmente bem alguns sistemas. Nesse capítulo vamos introduzir as funções de Green e o método das equações de movimento[79, 80, 76].

Podemos considerar em e Mecânica Estatística diferentes tipos de funções de Green. Aqui introduziremos três tipos, a função de Green causal, a retardada e a avançada. Elas são definidas respectivamente como:

$$G_c(t, t') = \langle \langle A(t); B(t') \rangle \rangle^c = -i \langle T A(t) B(t') \rangle, \quad (\text{A.1})$$

$$G_r(t, t') = \langle \langle A(t); B(t') \rangle \rangle^r = -i \theta(t - t') \langle [A(t), B(t')]_\eta \rangle, \quad (\text{A.2})$$

$$G_a(t, t') = \langle \langle A(t); B(t') \rangle \rangle^a = i \theta(t' - t) \langle [A(t), B(t')]_\eta \rangle, \quad (\text{A.3})$$

onde T é o operador de ordenação temporal.

A.1

Equação de movimento para as funções de Green

Na maior parte dessa tese utilizaremos a função de Green retardada, portanto vamos desenvolver suas equações de movimento. A fim de simplificar a notação vamos omitir o subíndice r na função retardada. Sempre que nos referirmos a outro tipo de função de Green vamos indicá-la com seu respectivo

subíndice. Derivando ambos os membros da Eq. (A.3) temos

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}G(t, t') &= \frac{d}{dt}\langle\langle A(t); B(t') \rangle\rangle = -i\frac{d}{dt}\theta(t-t')\langle[A(t), B(t')]_{\eta}\rangle \\ &+ \langle\langle \frac{d}{dt}A(t); B(t') \rangle\rangle, \end{aligned} \quad (\text{A.4})$$

onde utilizamos a equação de movimento do operador A ,

$$\frac{dA}{dt} = -i[A, H]_{-}. \quad (\text{A.5})$$

observando que a função $\theta(t)$ pode ser definida como

$$\theta(t) = \int_{-\infty}^t \delta(t) dt \quad (\text{A.6})$$

temos

$$\frac{d}{dt}\theta(t) = \delta(t) \quad (\text{A.7})$$

Assim podemos escrever,

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}\langle\langle A(t); B(t') \rangle\rangle &= -i\delta(t-t')\langle[A(t), B(t')]_{\eta}\rangle \\ &-i\theta(t-t')\langle[-i[A(t), H]_{-}; B(t')]\rangle \end{aligned} \quad (\text{A.8})$$

portanto,

$$i\frac{d}{dt}\langle\langle A(t); B(t') \rangle\rangle = \delta(t-t')\langle[A(t), B(t')]_{\eta}\rangle + \langle\langle [A(t), H]_{-}; B(t') \rangle\rangle. \quad (\text{A.9})$$

Essa é a equação de movimento para a função de Green dependente do tempo. Como as funções de Green dependem, apenas de $t - t'$ podemos tomar a transformada de Fourier em ambos os membros da Eq. A.9, fazendo $t' = 0$

$$\begin{aligned} \mathfrak{F}\left\{i\frac{d}{dt}\langle\langle A(t); B(0) \rangle\rangle\right\} &= \mathfrak{F}\left\{\delta(t-t')\langle[A(t), B(t')]_{\eta}\rangle\right\} \\ &+ \mathfrak{F}\left\{\langle\langle [A(t), H]_{-}; B(t') \rangle\rangle\right\}, \end{aligned} \quad (\text{A.10})$$

obtendo

$$\boxed{\omega\langle\langle A; B \rangle\rangle_{\omega} = \langle[A, B]_{\eta}\rangle + \langle\langle [A, H]_{-}; B \rangle\rangle_{\omega}}, \quad (\text{A.11})$$

onde definimos a transformada de Fourier como

$$\mathfrak{F}\{f(x)\} = \int_{-\infty}^{\infty} f(k)e^{-ikx} dk. \quad (\text{A.12})$$

A expressão (A.11) é equação de movimento para as funções de Green no espaços das energias é a expressão fundamental para nossos cálculos. O subíndice ω indica que as funções de Green estão no espaço das energias.

Na expressão (A.11) a energia ω deve ser entendida com uma continuação analítica no espaço complexo. Para efeitos de cumprir com as definições (A.2) e (A.3) $\omega \rightarrow \omega + i\eta$ para as funções de Green retardadas e $\omega \rightarrow \omega - i\eta$ para as retardadas, sendo η um infinitesimal. Isso permite a convergência das integrais de Fourier acima.

O segundo termo da equação de movimento (Eq. A.11) gera uma serie de novas funções de Green, para as quais precisamos calcular iterativamente as equações de movimento, o que gera um hierarquia de funções de Green. A dificuldade em manusear as equações de movimento é que as funções de Green assim geradas são cada vez mais complicadas, quando o Hamiltoniano do sistema possui termos de muitos corpos. Nesse caso precisamos fazer certas aproximações a fim de truncar a hierarquia, obtendo um sistema fechado de equações. Na maior parte dos cálculos desta tese vamos utilizar as equações de movimento para determinar as funções de Green de interesse. As aproximações a serem feitas serão discutidas com cuidado, à media em que forem sendo feitas.

A.2

Valores esperados

Uma vez determinadas uma expressão para a função de Green desejada, podemos calcular diversas quantidades físicas de interesse. Elas, em geral envolvem valores esperados de produtos de operadores, por exemplo, a carga eletrônica $\langle c^\dagger c \rangle$, o número médio de bósons $\langle b^\dagger b \rangle$, etc. Tais valores podem, em geral, ser calculados a partir das funções de Green. Sendo A e B dois operadores quaisquer podemos calcular o valor esperado do produto AB por

$$\langle AB \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} J(\omega) f(\omega) d\omega, \quad (\text{A.13})$$

onde

$$J(\omega) = \frac{i}{2\pi} [G(w + i\eta) - G(w - i\eta)] \quad (\text{A.14})$$

é chamada de densidade espectral, $G(w) = \langle \langle A; B \rangle \rangle_\omega$ com η sendo um infinitesimal e $f(\omega)$ é a função de distribuição fermiônica ou bosônica.

Dependendo da natureza dos operadores A e B ela é dada por,

$$f(\omega) = \frac{1}{e^{\beta(\omega-\mu)} \mp 1}, \quad (\text{A.15})$$

onde $\beta = 1/(k_B T)$, sendo T a temperatura, k_B a constante de Boltzmann e μ o potencial químico. O sinal $+$ ($-$) corresponde a férmion (boson).

A.3

A partícula livre

A título de exemplo vamos aplicar as técnicas da equação de movimento para encontrar a função de Green de uma partícula livre. Como sabemos, devido à simetria de translação espacial, para a partícula livre o momento linear $\vec{k}$ é um bom número quântico. Em segunda quantização podemos escrever o Hamiltoniano para um tal sistema como

$$H = \sum_k \epsilon_k c_k^\dagger c_k, \quad (\text{A.16})$$

onde o operador $c_k^\dagger(c_k)$ cria(aniquila) um férmion com momento k e energia ϵ_k . De acordo com a Eq. (A.11) podemos escrever

$$G_{kk'} \equiv \langle \langle c_k; c_{k'}^\dagger \rangle \rangle_\omega = \frac{\delta_{k'k}}{\omega - \epsilon_k + i\eta}. \quad (\text{A.17})$$

A função delta no numerador garante que a função de Green é não nula somente se $k' = k$, o que impõe a conservação do momento linear. Com a expressão acima podemos determinar valor esperado $n_k \equiv \langle c_k^\dagger c_k \rangle$. Pela Eq. (A.13) temos

$$n_k = \int_{-\infty}^{\infty} \rho(\omega) f(\omega) d\omega, \quad (\text{A.18})$$

onde

$$\begin{aligned} \rho(\omega) &= \frac{i}{2\pi} \left[\frac{1}{\omega - \epsilon_k + i\eta} - \frac{1}{\omega - \epsilon_k - i\eta} \right] \\ &= \frac{1}{\pi} \frac{\eta}{(\omega - \epsilon_k)^2 + \eta^2} \\ &= \frac{-1}{\pi} \text{Im}\{G_{kk}(\omega)\} \\ &= \delta(\omega - \epsilon_k). \end{aligned} \quad (\text{A.19})$$

A última linha da equação acima segue do fato que podemos escrever a função delta de Dirac como

$$\delta(x - x_0) = \frac{1}{\pi} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{\epsilon}{(x - x_0)^2 + \epsilon^2}. \quad (\text{A.20})$$

Voltando à Eq. (A.18) podemos escrever

$$n_k = \frac{1}{e^{\frac{1}{k_B T}(\epsilon_k - \epsilon_F)} + 1} \quad (\text{A.21})$$

onde ϵ_F é o nível de Fermi, expressão idêntica à (A.15) como corresponde.

B

Acoplamento antiferromagnético no modelo de Anderson interagente: Transformação de Schrieffer-Wolff

Neste apêndice vamos mostrar de maneira breve como surge a correlação antiferromagnética entre spins localizados e spin de condução no Hamiltoniano de Anderson interagente, Eq. (2.29). Apresentaremos com mais detalhes os cálculos desenvolvido por Hewson na Ref. [12].

Suponhamos que o sistema se encontra numa situação em que seu estado fundamental constitui de um único elétron na impureza. Vamos derivar um Hamiltoniano efetivo que leva em conta os processos virtuais envolvendo os estados excitados. Esses estados excitados necessariamente envolverão estados de zero e dois elétrons na impureza. Vamos decompor a função de onda do sistema em funções de ondas correspondentes a essas ocupações,

$$\Psi = \begin{pmatrix} \Psi_0 \\ \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix}, \quad (\text{B.1})$$

Onde, Ψ_n correspondem à componente da função de onda total projetada no espaço de Hilbert correspondente a n elétrons na impureza. Pode-se projetar também o Hamiltoniano sobre esse espaço. O Hamiltoniano projetado pode ser escrito por:

$$H = \begin{pmatrix} H_{00} & H_{01} & H_{02} \\ H_{10} & H_{11} & H_{12} \\ H_{20} & H_{21} & H_{22} \end{pmatrix}, \quad (\text{B.2})$$

onde

$$H_{mn} = P_m H P_n. \quad (\text{B.3})$$

Aqui, P_n é o operador de projeção sobre o respectivo espaço de Hilbert contendo n elétrons na impureza e H é o Hamiltoniano de Anderson dado

pela Eq. (2.29). Explicitamente esses operadores podem ser escritos como:

$$P_0 = (1 - n_{d\uparrow})(1 - n_{d\downarrow}) \quad (\text{B.4a})$$

$$P_1 = n_{d\uparrow} + n_{d\downarrow} - 2n_{d\uparrow}n_{d\downarrow} \quad (\text{B.4b})$$

$$P_2 = n_{d\uparrow}n_{d\downarrow}. \quad (\text{B.4c})$$

A Equação de Shřrodinger, $H\Psi = E\Psi$, se escreve então:

$$\begin{pmatrix} H_{00} & H_{01} & 0 \\ H_{10} & H_{11} & H_{12} \\ 0 & H_{21} & H_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Psi_0 \\ \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \Psi_0 \\ \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix} \quad (\text{B.5})$$

Onde já tomamos o fato de que o Hamiltoniano não conecta subspaços contendo diferença de mais de um eletrons, ($H_{02} = H_{20} = 0$), além disso como o Hamiltoniano deve ser hermitiano temos necessariamente $H_{10} = H_{01}^\dagger$ e $H_{21} = H_{12}^\dagger$. Usando a Eq.B.5 podemos escrever

$$H_{00}\Psi_0 + H_{01}\Psi_1 = E\Psi_0, \quad (\text{B.6a})$$

$$H_{10}\Psi_0 + H_{11}\Psi_1 + H_{12}\Psi_2 = E\Psi_1, \quad (\text{B.6b})$$

$$H_{21}\Psi_1 + H_{22}\Psi_2 = E\Psi_2. \quad (\text{B.6c})$$

Resolvendo o sistema acima para Ψ_1 temos:

$$\left[H_{10} (E - H_{00})^{-1} H_{01} + H_{11} + H_{12} (E - H_{22})^{-1} H_{21} \right] \Psi_1 = E\Psi_1. \quad (\text{B.7})$$

Até agora nenhuma aproximação foi feita, e obtemos um Hamiltoniano efetivo que atua apenas no subspaço de Ψ_1 . Da equação acima o identificamos por

$$\tilde{H}_{11} = H_{10} (E - H_{00})^{-1} H_{01} + H_{11} + H_{12} (E - H_{22})^{-1} H_{21}. \quad (\text{B.8})$$

Note que é necessário determinar explicitamente H_{10} , H_{00} , H_{01} , H_{11} , H_{12} , H_{22} e H_{21} . De acordo com a Eq. (B.3) e pelas Eqs. (B.4a-B.4c) e (2.29), depois de

alguma algebra de operadores um pouco tediosa podemos escrever:

$$H_{00} = \sum_{k\sigma} \epsilon_k c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma} = H_0, \quad (\text{B.9a})$$

$$H_{11} = \sum_{\sigma} \epsilon_d c_{d\sigma}^\dagger c_{d\sigma} \quad (\text{B.9b})$$

$$H_{10} = \sum_{k\sigma} V_k c_{d\sigma}^\dagger c_{k\sigma} (1 - n_{d\bar{\sigma}}) \quad (\text{B.9c})$$

$$H_{01} = \sum_{k\sigma} V_k^* c_{k\sigma}^\dagger c_{d\sigma} (1 - n_{d\bar{\sigma}}) \quad (\text{B.9d})$$

$$H_{22} = (2\epsilon_d + U + H_0) n_{d\uparrow} n_{d\downarrow} \quad (\text{B.9e})$$

$$H_{21} = \sum_{k\sigma} V_k c_{d\sigma}^\dagger c_{k\sigma} n_{d\bar{\sigma}} \quad (\text{B.9f})$$

$$H_{12} = \sum_{k\sigma} V_k^* c_{k\sigma}^\dagger c_{d\sigma} n_{d\bar{\sigma}}. \quad (\text{B.9g})$$

Podemos calcular então, por exemplo o último termo da Eq. (B.7). Antes de utilizar a expressão acima, vamos expandir esse termo em série de Taylor,

$$H_{12} (E - H_{22})^{-1} H_{21} = H_{12} \frac{1}{E} \left[1 + \frac{H_{22}}{E} + \left(\frac{H_{22}}{E} \right)^2 + \dots \right] H_{21}, \quad (\text{B.10})$$

Agora, substituindo a Eq. (B.9g) e (B.9f) podemos escrever:

$$\begin{aligned} H_{12} (E - H_{22})^{-1} H_{21} &= \sum_{\substack{k k' \\ \sigma \sigma'}} V_k^* c_{k\sigma}^\dagger c_{d\sigma} n_{d\bar{\sigma}} \frac{1}{E} \left[1 + \frac{H_{22}}{E} + \left(\frac{H_{22}}{E} \right)^2 + \dots \right] \\ &\quad \times V_{k'} c_{d\sigma'}^\dagger c_{k'\sigma'} n_{d\bar{\sigma}'}. \end{aligned} \quad (\text{B.11})$$

Observando que

$$\begin{aligned} c_{k\sigma}^\dagger c_{d\sigma} n_{d\bar{\sigma}} H_{22} &= c_{k\sigma}^\dagger c_{d\sigma} n_{d\bar{\sigma}} (2\epsilon_d + U + H_0) n_{d\uparrow} n_{d\downarrow} \\ &= (2\epsilon_d + U - \epsilon_k + H_0) c_{k\sigma}^\dagger c_{d\sigma} n_{d\bar{\sigma}} n_{d\uparrow} n_{d\downarrow} \\ &= (2\epsilon_d + U - \epsilon_k + H_0) c_{k\sigma}^\dagger c_{d\sigma} n_{d\bar{\sigma}}. \end{aligned} \quad (\text{B.12})$$

com isso podemos escrever a (B.11) como

$$\begin{aligned} H_{12} (E - H_{22})^{-1} H_{21} &= \sum_{\substack{k k' \\ \sigma \sigma'}} V_k^* V_{k'} \frac{1}{E} \left[1 + \frac{2\epsilon_d + U - \epsilon_k + H_0}{E} \right. \\ &\quad \left. + \frac{(2\epsilon_d + U - \epsilon_k + H_0)^2}{E^2} + \dots \right] \\ &\quad \times c_{k\sigma}^\dagger c_{d\sigma} n_{d\bar{\sigma}} c_{d\sigma'}^\dagger c_{k'\sigma'} n_{d\bar{\sigma}'}. \end{aligned} \quad (\text{B.13})$$

Podemos agora reorganizando a expansão entre colchetes acima, para tanto escrevamos:

$$\frac{1}{E} \left[1 + \frac{2\epsilon_d + U - \epsilon_k + H_0}{E} + \frac{(2\epsilon_d + U - \epsilon_k + H_0)^2}{E^2} + \dots \right] =$$

$$[E - 2\epsilon_d + U - \epsilon_k + H_0]^{-1} = \frac{-1}{\epsilon_d - U - \epsilon_k} \left[1 - \frac{E - \epsilon_d - H_0}{\epsilon_d - U - \epsilon_k} \right]. \quad (\text{B.14})$$

Substituindo esta última na (B.13) e rearranjando os operadores podemos escrever

$$H_{12} (E - H_{22})^{-1} H_{21} = \sum_{\substack{kk' \\ \sigma\sigma'}} \frac{-V_k^* V_{k'}}{\epsilon_d - U - \epsilon_k} \left[1 - \frac{E - \epsilon_d - H_0}{\epsilon_d - U - \epsilon_k} \right]^{-1} c_{k\sigma}^\dagger c_{k'\sigma'} c_{d\sigma} c_{d\sigma'}^\dagger n_{d\bar{\sigma}}.$$

(B.15)

Note que até agora nenhuma aproximação foi feita. Vamos agora desprezar o segundo termo entre colchetes da expressão acima. Isso significa que os efeitos dos processos virtuais do subspaço $n = 2$ sobre o subspaço $n = 1$ está sendo tomado em ordem zero no segundo termo entre colchetes. A fim de verificar o acoplamento antiferromagnético na expressão acima vamos fazer explicitamente a soma em σ e σ' na Eq. B.15. Tomando $\sigma = \downarrow$ e $\sigma' = \uparrow$.

$$H_{12} (E - H_{22})^{-1} H_{21} = \sum_{kk'} \frac{-V_k^* V_{k'}}{\epsilon_d + U - \epsilon_k} \left[c_{k\downarrow}^\dagger c_{k'\uparrow} c_{d\downarrow} c_{d\uparrow}^\dagger + c_{k\uparrow}^\dagger c_{k'\downarrow} c_{d\uparrow} c_{d\downarrow}^\dagger \right. \\ \left. + c_{k\uparrow}^\dagger c_{k'\uparrow} c_{d\uparrow} c_{d\uparrow}^\dagger n_{d\downarrow} + c_{k\downarrow}^\dagger c_{k'\downarrow} c_{d\downarrow} c_{d\downarrow}^\dagger n_{d\uparrow} \right]. \quad (\text{B.16})$$

No subspaço $n_d = 1$ podemos escrever $S^+ = c_{d\uparrow}^\dagger c_{d\downarrow}$, $S^- = c_{d\downarrow}^\dagger c_{d\uparrow}$, $n_{d\uparrow} + n_{d\downarrow} = 1$, $S_z = \frac{1}{2}(n_{d\uparrow} - n_{d\downarrow})$ e $n_{d\uparrow} n_{d\downarrow} = 0$. Com isso obtemos

$$H_{12} (E - H_{22})^{-1} H_{21} = \sum_{kk'} \frac{V_k^* V_{k'}}{\epsilon_d + U - \epsilon_k} \cdot \left[S^+ c_{k\downarrow}^\dagger c_{k'\uparrow} + S^- c_{k\uparrow}^\dagger c_{k'\downarrow} \right. \\ \left. + 2S_z \left(c_{k\uparrow}^\dagger c_{k'\uparrow} - c_{k\downarrow}^\dagger c_{k'\downarrow} \right) - \sum_{\sigma} c_{k\sigma}^\dagger c_{k'\sigma} n_{d\sigma} \right] \quad (\text{B.17})$$

onde definimos Observe que os dois primeiros termos entre parênteses da expressão acima envolve “*spin flip*”, que é a essência do efeito Kondo. Esses dois termos com terceiro corresponde ao modelo s-d proposto primeiramente por Zener em 1951, (Ref. [98]). O último termo por sua vez é um potencial espalhador não magnético. Procedendo de maneira semelhante para o primeiro termo da Eq. (B.7) e juntamente com essa última expressão obteremos um

Hamiltoniano efetivo com um acoplamento efetivo

$$J_{kk'} = V_k^* V_{k'} \left[\frac{1}{\epsilon_d + U - \epsilon_k} + \frac{1}{\epsilon_k - \epsilon_d} \right]. \quad (\text{B.18})$$

mais um termo de potencial espalhador, (veja seção 1.6 e 1.7 da Ref. [12]). Essas aproximações são válidas quando o elétron localizado não tem energia suficiente para sair da impureza, isto é $|\epsilon_F - \epsilon_d| \gg |\epsilon_k|$. O regime Kondo é atingido quando $\epsilon_d < \epsilon_F$ e $\epsilon_d + U > \epsilon_F$, veja figura 1.7. Nessas condições $J_{kk'} > 0$, o que favorece um acoplamento antiferromagnético. Schrieffer e Wolff Ref. [69] foram os primeiros a derivar o Hamiltoniano de Kondo a partir do Hamiltoniano de Anderson interagente, onde utilizaram uma transformação canônica.

C

Funções de Green para uma cadeia linear semi-infinita

Para deduzir uma expressão para uma cadeia linear infinita no modelo tight-binding vamos usar as idéias do grupo de renormalização. Nesse modelo o Hailotoniano do sistema pode ser escrito como

$$H_{TB} = \sum_{i=1}^{\infty} t c_i^{\dagger} c_{i+1}, \quad (\text{C.1})$$

onde, por conveniência consideramo a energia diagonal como sendo zero. Esse sistema pode ser representado como na figura C.1. A figura C.2 representa de renormalização. Para determinar a função de Green do sítio da extremidade sítio 1 da figura C.1 vamos representar a cadeia por um único sítio 1 efetivo, vestido com o restante da cadeia, como mostra a Fig. C.2a. Denotemos a função

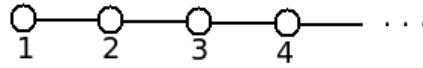


Figura C.1: Representação de uma cadeia linear semi-infinita no modelo tight-binding.

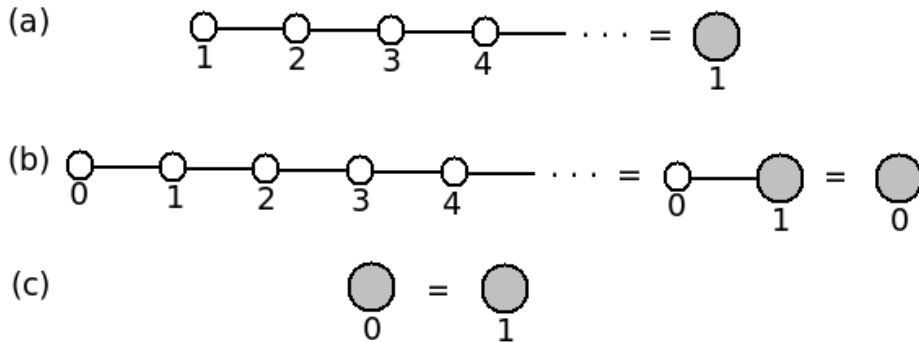


Figura C.2: Diagrama de renormalização da cadeia linear semi-infinita.

de Green despida de cada sítio da cadeia por

$$g_0(\omega) = \frac{1}{\omega} \quad (\text{C.2})$$

e do sítio renormalizado por $\tilde{g}(\omega)$, esse último a ser determinado. Da Fig. C.2b, usando as equações de movimento, podemos escrever (omitindo por instantes a dependência em ω por simplicidade de notação):

$$G_{00} = g_0 + \tilde{g}tG_{10} \quad (\text{C.3})$$

e

$$G_{10} = g_0tG_{00}. \quad (\text{C.4})$$

Resolvendo essas duas últimas para G_{00} temos:

$$G_{00} = \frac{g_0}{1 - \tilde{g}t^2g_0}. \quad (\text{C.5})$$

Pela figura C.2c podemos escrever $G_{00} = \tilde{g}$ ou

$$\tilde{g} = \frac{g_0}{1 - \tilde{g}t^2g_0} \Rightarrow -t^2g_0\tilde{g}^2 + \tilde{g} - g_0 = 0. \quad (\text{C.6})$$

A solução para a equação do segundo grau acima é:

$$\tilde{g} = \frac{-1 \pm \sqrt{1 - 4g_0^2t^2}}{-2g_0t^2}. \quad (\text{C.7})$$

substituindo a Eq. C.2 obtemos finalmente

$$\tilde{g}(\omega) = \frac{\omega - \sqrt{\omega^2 - 4t^2}}{2t^2}. \quad (\text{C.8})$$

O sinal da Eq C.7 foi escolhido a fim de garantir que $\tilde{g} \sim 1/\omega$ quando $\omega \rightarrow \infty$. A parte imaginária de $\tilde{g}$ só é não nula para $|\omega| < 2t$ e tem a forma de uma semicircunferência de raio $2t$. A densidade de estados é dada por $\tilde{\rho}(\omega) = -1/\pi \text{Im}\tilde{g}(\omega) = \frac{1}{2\pi t^2} \sqrt{\omega^2 - 4t^2} \theta(2t - \omega) \theta(2t + \omega)$. Note que a densidade de estados já está normalizada,

$$\int_{-\infty}^{\infty} \rho(\omega) d\omega = \frac{1}{2\pi t^2} \int_{-2t}^{2t} \sqrt{\omega^2 - 4t^2} d\omega = \frac{1}{2\pi t^2} \left[\frac{1}{2} \pi (2t)^2 \right] = 1. \quad (\text{C.9})$$

D

Funções de Green de um ponto quântico com dois níveis interagentes

Nesse apêndice vamos deduzir uma expressão exata para a função de Green local de um ponto quântico com dois níveis interagentes. O sistema a ser considerado pode ser descrito pelo Hamiltoniano,

$$H = \sum_{i=\alpha,\beta} \epsilon_i c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma} + \frac{1}{2} \sum_{i\sigma} U_i n_{i\sigma} n_{i\bar{\sigma}} + U' \sum_{\sigma\sigma'} n_{\alpha\sigma} n_{\beta\sigma'} \quad (\text{D.1})$$

Vamos utilizar as funções de Green definidas como[99],

$$G_{xyz}^{i\sigma}(\omega) = \langle \langle n_{j\sigma}^x n_{j\bar{\sigma}}^y n_{i\bar{\sigma}}^z c_{i\sigma}; c_{i\sigma}^\dagger \rangle \rangle_\omega. \quad (\text{D.2})$$

Na expressão acima, os índices i e j deve ser tais que se $i = \alpha$ então $j = \beta$ e vice-versa e x, y e z assumem valores 1 ou 2, de sendo $n_{i\sigma}^{(1)} = n_{i\sigma}$ e $n_{i\sigma}^{(2)} = 1 - n_{i\sigma}$. Na ausência da interação EF e dos acoplamentos com os reservatórios essa função de Green tem forma exata,

$$G_{xyz}^{i\sigma}(\omega) = \frac{\langle n_{j\sigma}^x n_{j\bar{\sigma}}^y n_{i\bar{\sigma}}^z \rangle}{\omega - E_i^{xyz}}, \quad (i \neq j) \quad (\text{D.3})$$

onde[99]

$$E_i^{xyz} = \epsilon_i + (2 - x)U_i + (4 - y - z)U'. \quad (\text{D.4})$$

A função de Green local é obtida por,

$$G_{i\sigma}(\omega) = \sum_{x,y,z} G_{xyz}^{i\sigma}(\omega) = \sum_{x,y,z} \frac{\langle n_{i\sigma}^x n_{j\sigma}^y n_{j\bar{\sigma}}^z \rangle}{\omega - E_i^{xyz}}. \quad (\text{D.5})$$

A fim de considerar o caso estudado no capítulo 5 vamos supor inicialmente que $U_i = U' = \infty$. Assim,

$$G_{i\sigma}(\omega) = \frac{P_{i\sigma}}{\omega - \epsilon_i}, \quad (\text{D.6})$$

onde

$$\begin{aligned} P_{i\sigma} &= \langle (1 - n_{i\bar{\sigma}})(1 - n_{j\sigma})(1 - n_{j\bar{\sigma}}) \rangle \\ &= 1 - \langle n_{j\bar{\sigma}} \rangle - \langle n_{j\sigma} \rangle - \langle n_{j\sigma} n_{j\bar{\sigma}} \rangle - \langle n_{i\bar{\sigma}} \rangle + \langle n_{i\bar{\sigma}} n_{j\bar{\sigma}} \rangle + \langle n_{i\bar{\sigma}} n_{j\sigma} \rangle \\ &\quad + \langle n_{i\bar{\sigma}} n_{j\sigma} n_{j\bar{\sigma}} \rangle \end{aligned} \quad (D.7)$$

Em princípio, todas as combinações que possuem mais de um elétron no PQ deve se anular, no entanto vamos preservar as combinações em que contenham 2 elétrons no PQ, sendo que eles residam em níveis diferentes e possuam mesmas projeções de spin. Assim, dessas combinações apenas o sexto termo da expressão acima deve ser preservado, obtendo portanto,

$$P_{i\sigma} = 1 - \langle n_{j\bar{\sigma}} \rangle - \langle n_{j\sigma} \rangle - \langle n_{i\bar{\sigma}} \rangle + \langle n_{i\bar{\sigma}} n_{j\bar{\sigma}} \rangle. \quad (D.8)$$

Note que a correlação $\langle n_{i\bar{\sigma}} n_{j\sigma} n_{j\bar{\sigma}} n_{i\sigma} \rangle$ pode ser calculado como,

$$\langle n_{i\bar{\sigma}}^{(x)} n_{j\sigma}^{(y)} n_{j\bar{\sigma}}^{(z)} n_{i\sigma} \rangle = \frac{-1}{\pi} \int \text{Im} G_{xyz}^{i\sigma}(\omega) f(\omega) d\omega, \quad (D.9)$$

onde $f(\omega)$ é a distribuição de Fermi. É fácil notar que

$$\langle n_{j\sigma} n_{i\sigma} \rangle = \frac{-1}{\pi} \int \text{Im} \sum_{x,z} G_{x1z}^{i\sigma}(\omega) f(\omega) d\omega. \quad (D.10)$$

Efetuada a soma acima e negligenciando os termos que correspondam a uma interação infinita obtemos,

$$\langle n_{j\sigma} n_{i\sigma} \rangle = \frac{-1}{\pi} \int \text{Im} \frac{\langle n_{j\sigma} \rangle}{\omega - \epsilon_i} f(\omega) d\omega. \quad (D.11)$$