

Ana Luiza Rodrigues Ferreira Ferrari

Teoria do funcional da densidade aplicada a um fio quântico acoplado a um ponto quântico

Trabalho de conclusão de curso apresentado ao
Programa de Graduação em Física do Instituto
de Física de São Carlos da Universidade de São
Paulo, para a obtenção do título de Bacharel em
Física.

Universidade de São Paulo – USP
Instituto de Física de São Carlos

Orientador: Luiz Nunes de Oliveira

São Carlos
2019

Ana Luiza Rodrigues Ferreira Ferrari

**Teoria do funcional da densidade aplicada a um fio quântico acoplado
a um ponto quântico/** Ana Luiza Rodrigues Ferreira Ferrari; Orientador: Luiz Nunes de Oliveira– São Carlos, 2019-

25 p.

Tese de conclusão de curso – Universidade de São Paulo – USP
Instituto de Física de São Carlos, 2019.

1. DFT. 2. Efeito Kondo. 3. Ponto quântico. I. Teoria do funcional da densidade aplicada a um ponto quântico acoplado a um fio quântico. II. Luiz Nunes de Oliveira, orientador.

Resumo

O objetivo deste trabalho é calcular a condutância linear a $T = 0$ de um fio quântico acoplado a um ponto quântico para avaliar o método pouco convencional empregado. A abordagem consiste no tratamento perturbativo do parâmetro de hibridização do Hamiltoniano de Anderson de uma impureza, onde teoria da perturbação e métodos variacionais, como a Teoria do Funcional da Densidade (DFT), deixam de funcionar para temperaturas menores que a temperatura Kondo. Mostra-se que o problema pode ser contornado calculando-se a defasagem dos níveis de energia do fio a altas temperaturas, por meio da qual a defasagem de baixas temperaturas é encontrada. Dessa forma, determinou-se a condutância do fio, que segue as previsões qualitativas e concorda com cálculos via Grupo de Renormalização Numérico (NRG) de forma satisfatória. Conclui-se que as propriedades de transporte de baixas temperaturas de sistemas modelados pelo Hamiltoniano de Anderson podem ser calculadas partindo do ponto fixo de altas temperaturas, o que abre portas para a utilização de DFT, de primeiros princípios.

Palavras-chaves: DFT. Efeito Kondo. Ponto quântico.

Sumário

1	INTRODUÇÃO	7
1.1	Descrição do dispositivo	7
1.1.1	O ponto quântico e o fio quântico	7
1.2	Descrição teórica	8
1.2.1	Segunda quantização	8
1.2.2	Os Hamiltonianos Modelo	8
1.2.3	O problema Kondo	9
1.2.4	A transformação partícula buraco	10
1.3	Referencial teórico	11
1.3.1	Defasagem das funções de onda do fio e a regra de soma de Friedel	11
1.3.2	Condutância	12
2	METODOLOGIA	13
2.1	Cálculo perturbativo	13
2.1.1	Matriz de perturbação em primeira ordem	14
2.1.2	Cálculo analítico dos elementos de matriz	15
2.1.3	Cálculo numérico da condutância	16
3	RESULTADOS	19
3.1	Condutância para $w = 0$	19
3.2	O efeito do potencial espalhador	20
3.3	Comparação com <i>NRG</i>	21
4	CONCLUSÃO	23
	REFERÊNCIAS	25

1 | Introdução

1.1 | Descrição do dispositivo

1.1.1 | O ponto quântico e o fio quântico

As propriedades de transporte de dispositivos nanoestruturados constituem um problema complexo e atual.^{1,2} Esses sistemas de baixas dimensões são importantes na busca de dispositivos eletrônicos menores e mais rápidos, cujo regime é, naturalmente, quântico. A compreensão destes sistemas requer uma combinação de métodos analíticos e numéricos. Nesse contexto, estudaremos a condução elétrica através de um dispositivo elementar: um ponto quântico acoplado a um fio quântico.

O ponto quântico e o fio quântico são estruturas eletrônicas, de tamanho reduzido, nas quais efeitos quânticos têm um papel fundamental. O confinamento dos elétrons na escala nanométrica, em duas e três de suas dimensões, respectivamente, gera um espectro discreto de energias, de forma análoga ao poço de potencial. O tunelamento dos elétrons permite a construção de dispositivos mais complexos, como o Single-Electron-Transistor, ou o arranjo geométrico semelhante aqui estudado.

O modelo consiste em um fio finito e unidimensional dividido em L sítios, tal que L é um número ímpar. Este fio está fracamente acoplado a um ponto quântico através do sítio central. Um potencial intra-sítio permite o controle do número de ocupação na impureza, região na qual os elétrons interagem via um termo de Coulomb.

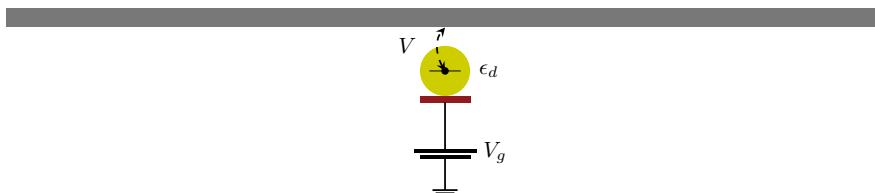


Figura 1 – Dispositivo esquematizado.
Fonte: Elaborada pela autora.

1.2 | Descrição teórica

1.2.1 | Segunda quantização

A física de muitos corpos é melhor descrita pela segunda quantização, também conhecida como o formalismo do número de ocupação. Nele, um estado é obtido listando a ocupação em cada um dos estados de base,

$$\text{Estado de } N\text{-partículas} : |\nu_1, \nu_2, \dots\rangle, \sum_j \nu_j = N, \quad (1.1)$$

onde no caso fermiônico, $\nu = 0, 1$.

Em seguida, é natural tratarmos do operador de criação (destruição) que aumenta (abaixa) o número de ocupação em uma unidade. Neste caso, o estado da Eq. (1.1) é reescrito como

$$\text{Estado de } N\text{-partículas} : c_{\nu_1}^\dagger c_{\nu_2}^\dagger \dots |\emptyset\rangle. \quad (1.2)$$

Estados fermiônicos são anti-simétricos na troca de orbitais. Em vista disso, os operadores de criação e aniquilação obedecem às relações

$$\{c_{\nu_i}^\dagger, c_{\nu_j}\} = \delta_{i,j}, \{c_{\nu_i}, c_{\nu_j}\} = 0, \{c_{\nu_i}^\dagger, c_{\nu_j}^\dagger\} = 0; \quad (1.3)$$

e todos os cálculos são baseados nesta álgebra de anti-comutação, que é tomada como uma identidade.

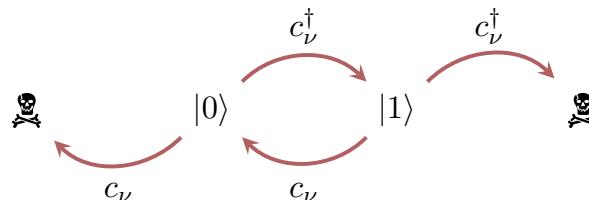


Figura 2 – Operadores fermiônicos de criação e aniquilação agindo sobre o espaço de Fock.

Fonte: Elaborada pela autora.

1.2.2 | Os Hamiltonianos Modelo

Muitos graus de liberdade interagem em sistemas eletrônicos correlacionados, e a consideração de todas estas interações torna o problema impossível de ser resolvido. Por essa razão, usamos Hamiltonianos Modelo: eles reconhecem as contribuições mais importantes à descrição, simplificando o tratamento. Dentre estes, está o Hamiltoniano de Anderson de uma impureza ³,

$$H_A = -t \sum_{\mu \in \mathcal{M}, l \in \mathcal{L}} (c_{l,\mu}^\dagger c_{l+1,\mu} + H.c.) + V_g \hat{n}_d + w \hat{n}_0 + U n_{d\uparrow} n_{d\downarrow} + V \sum_{\mu \in \mathcal{M}} (d_\mu^\dagger c_{0,\mu} + H.c.), \quad (1.4)$$

com $\mathcal{L} = \left[-\frac{(L-1)}{2}, \dots, \frac{(L-1)}{2} \right]$ e $\mathcal{M} = [\uparrow, \downarrow]$.

No dispositivo que tratamos, a impureza (d) do Hamiltoniano acima é o ponto quântico. Nela, um potencial intra-sítio V_g controla o número de ocupação e compete com a repulsão Coulombiana, que penaliza com uma energia $U > 0$ a ocupação dupla. Elétrons no ponto quântico podem tunelar para o fio através de um termo de hibridização, com amplitude de tunelamento V . No sítio central, atua um potencial espalhador w . Por fim, a banda de condução é modelada por elétrons não interagentes na aproximação *tight-binding*, na qual férmions só podem saltar para vizinhos próximos.

No regime paramétrico que favorece a ocupação unitária na impureza da Eq. (1.4) (impureza magnética), o sistema é equivalentemente descrito pelo Hamiltoniano de Kondo, conforme mostra a transformação de Schrieffer-Wolff.⁴ Nessa visão, nosso sistema é descrito por

$$H_K = -t \sum_{\mu \in \mathcal{M}, l \in \mathcal{L}} (c_{l,\mu}^\dagger c_{l+1,\mu} + H.c.) + J \mathbf{S}_d \cdot \mathbf{S}_0 + Kn_0 \quad (1.5)$$

onde

$$\mathbf{S}_0 = \frac{1}{2} \sum_{\mu,\nu} c_{0,\mu}^\dagger \sigma_{\mu,\nu} c_{0,\nu} \quad (1.6)$$

é o operador de spin do sítio $l = 0$, e

$$\mathbf{S}_d = \frac{1}{2} \sum_{\mu,\nu} d_\mu^\dagger \sigma_{\mu,\nu} d_\nu \quad (1.7)$$

é o operador de spin do ponto quântico.

O ponto quântico e a banda de condução se acoplam anti-ferromagnéticamente, pois $J > 0$. Assim, a situação energética mais favorável ocorre quando os elétrons do fio e \vec{S}_d formam um singuleto, que deve ser a configuração no zero absoluto.

1.2.3 | O problema Kondo

Em 1964, Kondo⁵ utilizou teoria de perturbação de terceira ordem no acoplamento J de seu modelo para explicar um mínimo de resistividade em ligas magnéticas diluídas. Embora bem sucedida em altas temperaturas, sua descrição divergia conforme $T \rightarrow 0$, e uma teoria mais abrangente era necessária para uma compreensão completa do problema, chamado de problema de Kondo. Hoje, sabe-se que abordagens perturbativas dos sistemas com impurezas magnéticas funcionam bem quando $T \gg T_k$, onde T_k é uma temperatura finita, chamada de temperatura Kondo. Este problema é usualmente resolvido com o Grupo de Renormalização numérico (NRG), desenvolvido nos anos 70⁶, que é não perturbativo e essencialmente exato, ou pelo método do Ansatz de Bethe.^{7 8}

O comportamento com a temperatura do Hamiltoniano de Anderson , Eq. (1.4), está ilustrada na figura 3. Temperaturas altas geram uma probabilidade maior de que o sistema se

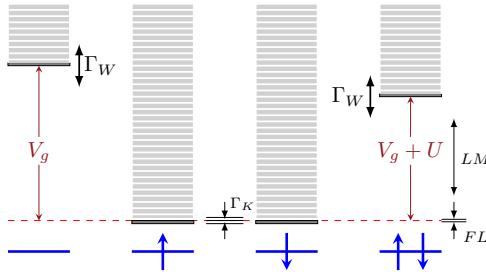


Figura 3 – Relação entre os parâmetros e os pontos fixos do Hamiltoniano de Anderson. Γ_W é proporcional ao quadrado de V .

Fonte: Elaborada pela autora.

encontre em um estado excitado. Isso significa que a energia das excitações térmicas é grande o suficiente para tornar insignificante as diferenças entre os níveis mostrados, e todas as ocupações do ponto quântico são acessíveis. Conforme a temperatura abaixa, a ocupação unitária se torna mais vantajosa. Em seguida, o Hamiltoniano de Anderson se encontra em um ponto fixo chamado de *Local Moment*, no qual a transformação de Schieffer-Wolff começa a valer e apenas a ocupação unitária se torna possível. Em temperaturas abaixo de T_k , o ponto quântico se torna uma impureza magnética, blindada por elétrons da banda de condução. Neste ponto fixo, chamado de *Frozen Level*, os elétrons do ponto quântico formam um estado de singuleto com os do fio quântico, o que caracteriza o regime Kondo.

Em altas temperaturas, o acoplamento com a banda de condução nos Hamiltonianos das Eqs. (1.4) e (1.5) pode ser tratado como perturbação, pois sua contribuição para as energias é muito pequena. Fisicamente, isso fica claro no Hamiltoniano de Kondo, pois $\langle \mathbf{S}_d \cdot \mathbf{S}_0 \rangle \approx \mathbf{0}$ quando $T \gg T_k$. Por conseguinte, em ordem zero na teoria de perturbação, podemos desconsiderar o acoplamento entre o ponto quântico e a banda de condução nos dois modelos. Podemos então calcular exatamente qualquer propriedade associada ao ponto quântico, no modelo de Anderson.

1.2.4 | A transformação partícula buraco

Um sistema invariante pela transformação partícula-buraco possui uma simetria, pois a física é a mesma se todas as partículas forem trocadas por suas anti-partículas (buracos). Definimos essa transformação, para os Hamiltonianos das Eqs. (1.4) e (1.5), como

$$\begin{aligned} c_{l\mu} &\rightarrow (-1)^l c_{l\mu}^\dagger \\ d_\mu &\rightarrow -d_\mu^\dagger, \end{aligned} \tag{1.8}$$

e obtemos, a menos de constantes aditivas, os Hamiltonianos transformados. Em particular, para o Hamiltoniano de Anderson,

$$\bar{H}_A = -t \sum_{\mu \in \mathcal{M}, l \in \mathcal{L}} (c_{l,\mu}^\dagger c_{l+1,\mu} + H.c.) - (V_g + U) \hat{n}_d + U n_{d\uparrow} n_{d\downarrow} - w \hat{n}_0 + V \sum_{\mu \in \mathcal{M}} (d_\mu^\dagger c_{0,\mu} + H.c.). \tag{1.9}$$

A condição para termos simetria partícula buraco é a igualdade dos Hamiltonianos das Eqs. (1.4) e (1.9); o que implica nas relações

$$2V_g + U = 0, \quad w = 0, \quad (1.10)$$

entre os parâmetros do modelo de Anderson. Dessa forma, no ponto simétrico, as energias no subespaço do ponto quântico são tais que a ocupação $n_d = 1$ é energeticamente favorável, conforme mostra a figura 4.

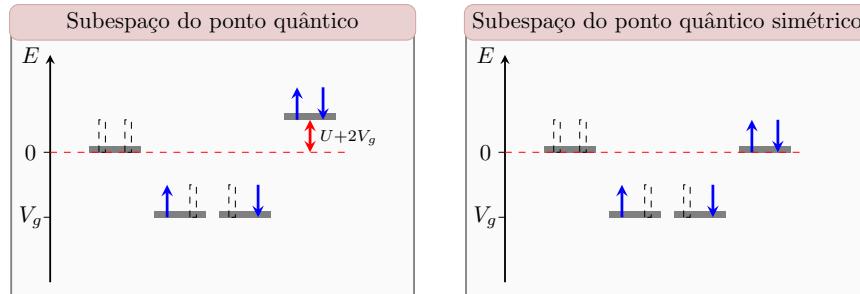


Figura 4 – Transformação partícula buraco no Hamiltoniano de Anderson.
Fonte: Elaborada pela autora.

1.3 | Referencial teórico

1.3.1 | Defasagem das funções de onda do fio e a regra de soma de Friedel

O Hamiltoniano da banda de condução, diagonalizado, é

$$H_{bc} = \sum_{\ell} \varepsilon_{\ell} g_{\ell}^{\dagger} g_{\ell}, \quad (1.11)$$

onde ε_{ℓ} é o espectro de energias sem a presença da impureza. A altas e baixas temperaturas tudo se passa como se o acoplamento com a impureza trouxesse um novo nível de energia que deve ser acomodado neste espectro, portanto, todos os níveis são transladados e se tornam

$$\epsilon_{\ell} \equiv \varepsilon_{\ell} - \frac{\Delta}{\pi} \delta_{\ell}, \quad (1.12)$$

onde Δ é a separação entre níveis. Assim, a Eq. (1.12) define a defasagem δ_{ℓ} .

Em baixas temperaturas, os estados extras que a impureza insere abaixo do nível de Fermi devem dispor de carga suficiente para blindá-la. Por essa razão, existe uma relação entre a carga extra no fio n_w e a defasagem no nível de Fermi. Chamada Regra de Soma de Friedel para o modelo de Anderson⁹, essa relação foi obtida por Langreth e é expressa pela equação

$$n_w = \frac{2\delta_0}{\pi}. \quad (1.13)$$

Quando o potencial espalhador é nulo, esta carga é somente devido à blindagem. Para que a blindagem do spin do ponto quântico seja completa, um spin oposto deve acumular-se no fio. Assim, a carga n_w no fio deve coincidir com a carga $\langle n_d \rangle$ no ponto quântico.

Especificamente no ponto simétrico ($w = 0$), $\langle n_d \rangle = 1$, e de acordo com a Eq. (1.13), $\delta_0 = \pi/2$. Dessa forma, uma defasagem de $\pi/2$ está associada à formação da nuvem Kondo, e uma vez que tivermos a defasagem de altas temperaturas δ_T , a defasagem de baixas temperaturas será

$$\delta_0 = \delta_T + \pi/2. \quad (1.14)$$

1.3.2 | Condutância

A condutância do fio quântico para $T \ll T_k$ é dada por ¹⁰

$$G(T) = \mathcal{G}_2 \cos^2(\delta_0) \quad (T \ll T_k), \quad (1.15)$$

onde $\mathcal{G}_2 \equiv 2e^2/h$ é o quantum de condutância.

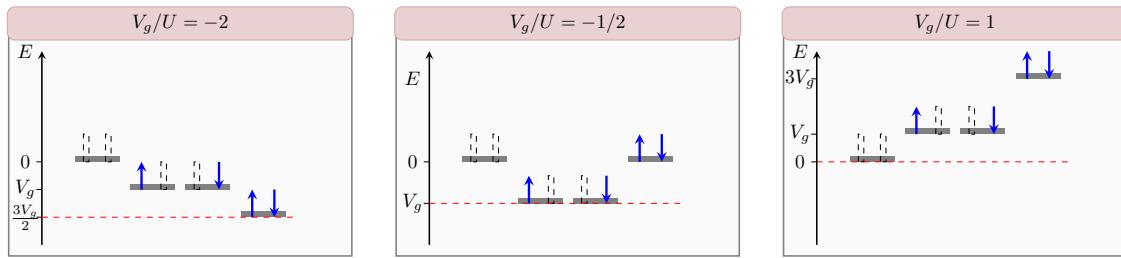


Figura 5 – Sub-espacôo do ponto quântico para três valores da razão V_g/U .
Fonte: Elaborada pela autora.

Na figura 5, da esquerda para a direita, vemos que os níveis de energia mais baixos do ponto quântico terão ocupação $\langle n_d \rangle = 2, 1, 0$, respectivamente. Para V suficientemente pequeno, os estados fundamentais também terão estas ocupações. Mediante a regra de soma de Friedel, podemos calcular as correspondentes defasagens e condutâncias. Estes resultados são mostrados na tabela 1. Desta forma, para baixas temperaturas e $w = 0$, esperamos que um gráfico de

Tabela 1 – Resultados previstos para alguns parâmetros do modelo de Anderson, $w = 0$.

V_g/U	$\langle n_d \rangle$	δ_0	$G(T \rightarrow 0)$
-2	2	π	\mathcal{G}_2
-0.5	1	$\frac{\pi}{2}$	0
-1	0	2π	\mathcal{G}_2

$G \times V_g/U$ mostre uma condutância nula no ponto simétrico que cresce continuamente e de forma igual para os dois lados, até alcançar o valor balístico. Além disso, em torno do ponto simétrico, devemos observar um plateau de condutância nula.

2 | Metodologia

2.1 | Cálculo perturbativo

Em ordem nula de perturbação, o estado fundamental de muitos corpos é o produto tensorial do estado fundamental da banda de condução e do ponto quântico. Conforme mostra a figura 5, a determinação deste estado depende da configuração do ponto quântico. Como existem quatro configurações, os candidatos ao mínimo de energia, com $Q = 0$, $S = 0$ ou $S = 1$ e $S_z = 0$ são

$$|\Omega_t\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (d_{\uparrow}^{\dagger} g_{0,\downarrow}^{\dagger} + d_{\downarrow}^{\dagger} g_{0,\uparrow}^{\dagger}) |\Omega_0\rangle, \quad (S_z = 0, S = 1, E_d^0 = V_g) \quad (2.1)$$

$$|\Omega_s\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (d_{\uparrow}^{\dagger} g_{0,\downarrow}^{\dagger} - d_{\downarrow}^{\dagger} g_{0,\uparrow}^{\dagger}) |\Omega_0\rangle, \quad (S_z = 0, S = 0, E_d^0 = V_g) \quad (2.2)$$

$$|\Lambda_0\rangle = d_{\uparrow}^{\dagger} d_{\downarrow}^{\dagger} |\Omega_0\rangle, \quad (S_z = 0, S = 0, E_d^0 = 2V_g + U) \quad (2.3)$$

e

$$|\Psi_0\rangle = g_{0\uparrow}^{\dagger} g_{0\downarrow}^{\dagger} |\Omega_0\rangle, \quad (S_z = 0, S = 0, E_d^0 = 0) \quad (2.4)$$

onde $|\Omega_0\rangle$ (figura 6) denota um estado com todos os níveis da banda de condução abaixo do nível de Fermi preenchidos. Dependendo dos parâmetros do modelo, eles podem ser degenerados. Consequentemente, usamos teoria da perturbação degenerada.

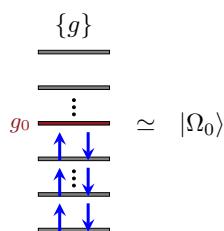


Figura 6 – Definição do estado $|\Omega_0\rangle$ usado na construção dos demais estados. Todos os níveis abaixo do nível de Fermi g_0 estão preenchidos. $\{g\}$ é a base dos autoestados da banda de condução.
Fonte: Elaborada pela autora.

Estamos interessados na defasagem δ_T das funções de onda eletrônicas do fio no estado fundamental de altas temperaturas. Para tal, podemos encontrar as energias corrigida dos

estados com um elétron a mais no nível k e com um buraco a mais no nível \bar{k} , com $S_z = 1/2$ e $S = 1/2$. As energias destes estados de muitos corpos são

$$E_k = E_k^0 - \Delta \frac{\delta_k}{\pi} = E_{cb,k}^0 + E_{dot,k}^0 - \Delta \frac{\delta_k}{\pi}, \quad (2.5)$$

e

$$E_{\bar{k}} = E_{\bar{k}}^0 + \Delta \frac{\delta_{\bar{k}}}{\pi} = E_{cb,\bar{k}}^0 + E_{dot,\bar{k}}^0 + \Delta \frac{\delta_{\bar{k}}}{\pi}. \quad (2.6)$$

Como a banda de condução possui simetria partícula buraco, $E_{cb,k}^0 = E_{cb,\bar{k}}^0$. Além disso, para os mesmos parâmetros do Hamiltoniano, o ponto quântico possui sempre a mesma energia em ordem nula de perturbação, portanto, $E_{dot,k}^0 = E_{dot,\bar{k}}^0$. Feitas estas considerações, a defasagem δ_T é

$$\delta_T = \frac{\pi}{2} \frac{E_{\bar{k}} - E_k}{\Delta}, \quad (2.7)$$

e consequentemente, o cálculo perturbativo das energias permite determinar δ_T .

2.1.1 | Matriz de perturbação em primeira ordem

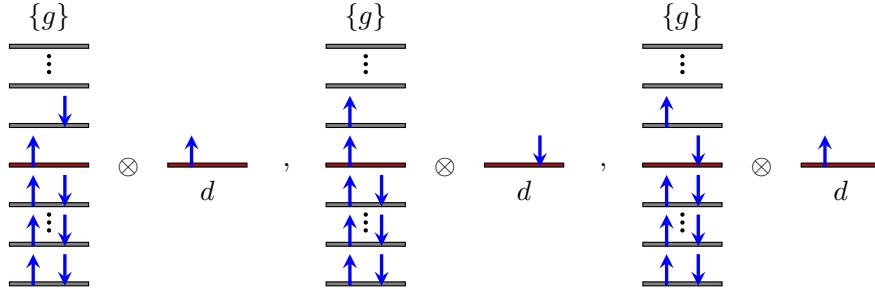


Figura 7 – Estados de referência no caso com um elétron a mais no nível $k = 1$.

Fonte: Elaborada pela autora.

Os estados de referência para a construção da matriz de perturbação são os de energia E_k e $E_{\bar{k}}$. Dessa forma, os estados que a constituem possuem elementos de matriz com os estados de referência. Como a matriz só deve conter estados com $S_z = 1/2$ e $S = 1/2$, os estados de referência com energia E_k (figura 7) são

$$|\Omega_d\rangle = \frac{(d_{\uparrow}^\dagger g_{0\downarrow}^\dagger - d_{\downarrow}^\dagger g_{0\uparrow}^\dagger)}{\sqrt{2}} g_{k\uparrow}^\dagger |\Omega_0\rangle \quad (2.8)$$

e

$$|\Omega'_d\rangle = \frac{(d_{\uparrow}^\dagger g_{0\downarrow}^\dagger g_{k\uparrow}^\dagger + d_{\downarrow}^\dagger g_{0\uparrow}^\dagger g_{k\uparrow}^\dagger - 2d_{\uparrow}^\dagger g_{0\uparrow}^\dagger g_{k\downarrow}^\dagger)}{\sqrt{6}} |\Omega_0\rangle. \quad (2.9)$$

Analogamente, para o caso com um buraco a mais abaixo do nível de Fermi, os estados de referência com energia $E_{\bar{k}}$, $S_z = 1/2$ e $S = 1/2$, são

$$|\bar{\Omega}_d\rangle = \frac{(d_{\uparrow}^\dagger g_{0\downarrow}^\dagger - d_{\downarrow}^\dagger g_{0\uparrow}^\dagger)}{\sqrt{2}} g_{\bar{k}\uparrow}^\dagger |\Omega_{\bar{k}}\rangle \quad (2.10)$$

e

$$|\bar{\Omega}'_d\rangle = \frac{(d_{\uparrow}^{\dagger}g_{0\downarrow}^{\dagger}g_{\bar{k}\uparrow}^{\dagger} + d_{\downarrow}^{\dagger}g_{0\uparrow}^{\dagger}g_{\bar{k}\uparrow}^{\dagger} - 2d_{\uparrow}^{\dagger}g_{0\uparrow}^{\dagger}g_{\bar{k}\downarrow}^{\dagger})}{\sqrt{6}} |\Omega_{\bar{k}}\rangle; \quad (2.11)$$

Aqui, o estado $|\Omega_{\bar{k}}\rangle$ possui todos os níveis abaixo do nível de Fermi preenchidos, exceto \bar{k} .

A figura 8 esquematiza como a base em que é expressa a matriz de perturbação é determinada. Por fim, seguindo este procedimento, as tabelas 2 e 3 mostram as bases utilizadas para os subespaços $Q = 1$ e $Q = -1$, respectivamente.

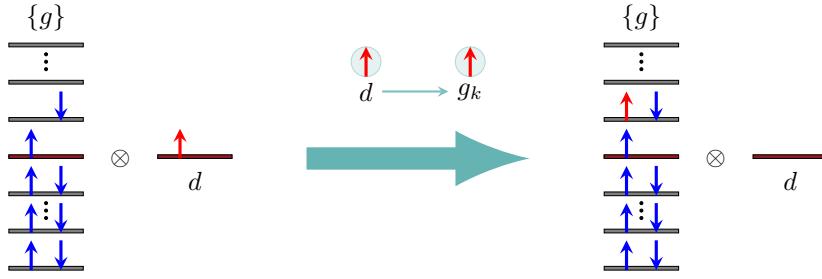


Figura 8 – A perturbação permite a troca de um elétron (buraco) da banda de condução com um buraco (elétron) do ponto quântico.

Fonte: Elaborada pela autora.

Tabela 2 – Estados que tem elementos de matriz com $|\Omega_d\rangle$ e $|\Omega'_d\rangle$ para formação da matriz perturbativa do subespaço $Q = 1$. O subíndice d (dubletos) em alguns dos estados se refere a duas combinações lineares mutuamente ortogonais com $S = 1/2$ da soma de três spins $1/2$.

$\langle n_d \rangle = 0$	$\langle n_d \rangle = 2$
$ kk\rangle = g_{k\uparrow}^{\dagger}g_{k\downarrow}^{\dagger}g_{0\uparrow}^{\dagger} \Omega_0\rangle$	$ kd\rangle = g_{k\uparrow}^{\dagger}d_{\downarrow}^{\dagger}d_{\uparrow}^{\dagger} \Omega_0\rangle$
$ k0\rangle = g_{k\uparrow}^{\dagger}g_{0\uparrow}^{\dagger}g_{0\downarrow}^{\dagger} \Omega_0\rangle$	$ dd\rangle = g_{0\uparrow}^{\dagger}d_{\uparrow}^{\dagger}d_{\downarrow}^{\dagger} \Omega_0\rangle$
$ kq\rangle = (g_q^{\dagger}g_k^{\dagger}g_0^{\dagger})_d \Omega_0\rangle$	$ k\bar{q}\rangle = (g_{\bar{q}}^{\dagger}g_k^{\dagger}g_0^{\dagger})_d d_{\uparrow}^{\dagger}d_{\downarrow}^{\dagger} \Omega_0\rangle$

Tabela 3 – Estados que tem elementos de matriz com $|\bar{\Omega}_d\rangle$ e $|\bar{\Omega}'_d\rangle$ para formação da matriz perturbativa do subespaço $Q = -1$.

$\langle n_d \rangle = 0$	$\langle n_d \rangle = 2$
$ \bar{k}0\rangle = g_{\bar{k}\uparrow}^{\dagger}g_{0\uparrow}^{\dagger}g_{0\downarrow}^{\dagger} \Omega_{\bar{k}}\rangle$	$ \bar{k}\bar{k}\rangle = g_{0\uparrow}^{\dagger}d_{\downarrow}^{\dagger}d_{\uparrow}^{\dagger} \Omega_{\bar{k}}\rangle$
$ 00\rangle = g_{0\uparrow}^{\dagger} \Omega_0\rangle$	$ \bar{k}d\rangle = g_{\bar{k}\uparrow}^{\dagger}d_{\uparrow}^{\dagger}d_{\downarrow}^{\dagger} \Omega_{\bar{k}}\rangle$
$ \bar{k}q\rangle = (g_q^{\dagger}g_{\bar{k}}^{\dagger}g_0^{\dagger})_d \Omega_{\bar{k}}\rangle$	$ \bar{k}\bar{q}\rangle = (g_{\bar{q}}^{\dagger}g_{\bar{k}}^{\dagger}g_0^{\dagger})_d d_{\uparrow}^{\dagger}d_{\downarrow}^{\dagger} \Omega_0\rangle$

2.1.2 | Cálculo analítico dos elementos de matriz

A perturbação necessariamente muda o número de ocupação no ponto quântico de uma unidade. Por conseguinte, não existem elementos de matriz entre estados contidos nas

tabelas 2 e 3. Todavia, estes estados se ligam com os estados de referência, já que a própria construção deles leva isso em consideração. Como tratamos de uma base pequena, podemos calcular analiticamente os elementos de matriz que nos dão as matrizes das Eqs. (2.14) e (2.15). Elas são escritas nas bases

$$\{|\Omega_d\rangle, |\Omega'_d\rangle, |k0\rangle, |kk\rangle, |kq\rangle, |kq'\rangle, |kd\rangle, |dd\rangle, |k\bar{q}\rangle, |k\bar{q}'\rangle\}, \quad (2.12)$$

$$\{|\bar{\Omega}_d\rangle, |\bar{\Omega}'_d\rangle, |\bar{k}0\rangle, |00\rangle, |\bar{k}q\rangle, |\bar{k}q'\rangle, |\bar{k}d\rangle, |\bar{k}\bar{k}\rangle, |\bar{k}\bar{q}\rangle, |\bar{k}\bar{q}'\rangle\}, \quad (2.13)$$

e estão contidas no fim da seção.

2.1.3 | Cálculo numérico da condutância

As matrizes das Eqs. (2.14) e (2.15) são somadas às matrizes das energias não perturbadas dos estados da base, e a soma é diagonalizada numéricamente. As energias também precisam ser encontradas via um procedimento numérico, pois dependem do número de estados de uma partícula da banda de condução.

A figura 9 mostra a sequência de funções chamadas no cálculo numérico. A função `plota_resultados` recebe como parâmetros V , U e w , do modelo de Anderson. Para $V_g \in [-2U, U]$, ela calcula a defasagem com a Eq. (2.7). Este cálculo envolve a separação dos níveis próximos ao nível k , Δ , que é calculada na função `Delta`. Esta função usa o espectro da banda de condução, obtido de `diagonaliza_matriz_banda`, e calcula a diferença entre as energias. Por fim, as funções `E_k_mais` e `E_k_menos` retornam as energias corrigidas mais baixas dos dois subespaços de interesse, por meio da diagonalização das matrizes das Eqs. (2.14) e (2.15), já somadas às matrizes das energias não perturbadas.

Com a defasagem calculada no intervalo $V_g \in [-2U, U]$, fazemos os gráficos de $\delta \times V_g/U$ e $G/G_2 \times V_g/U$. Estes resultados correspondem ao sistema de altas temperaturas, já que foram obtidos perturbativamente. Para atingirmos baixas temperaturas, basta somarmos $\pi/2$ à defasagem de altas temperaturas, conforme a Eq. (1.14).



Figura 9 – Funções chamadas pelo programa. As cores representam a camada do código na qual os comandos estão localizados.

Fonte: Elaborada pela autora.

$$\hat{V}_k = V \begin{pmatrix} 0 & 0 & \sqrt{2}\{c_0^\dagger, g_0\} & -\frac{\{c_0^\dagger, g_k\}}{\sqrt{2}} & \{c_0^\dagger, g_q\} & 0 & \{c_0^\dagger, g_{\bar{q}}\} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{\frac{3}{2}}\{c_0^\dagger, g_k\} & 0 & -\{c_0^\dagger, g_q\} & 0 & \{c_0^\dagger, g_{\bar{q}}\} \\ \sqrt{2}\{c_0^\dagger, g_0\} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{\frac{3}{2}}\{c_0^\dagger, g_k\} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{\{c_0^\dagger, g_k\}}{\sqrt{2}} & \sqrt{\frac{3}{2}}\{c_0^\dagger, g_k\} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \{c_0^\dagger, g_q\} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\{c_0^\dagger, g_q\} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \sqrt{2}\{c_0^\dagger, g_0\} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{\{c_0^\dagger, g_k\}}{\sqrt{2}} & \sqrt{\frac{3}{2}}\{c_0^\dagger, g_k\} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \{c_0^\dagger, g_{\bar{q}}\} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (2.14)$$

$$\hat{V}_k = V \begin{pmatrix} 0 & 0 & \sqrt{2}\{c_0^\dagger, g_0\} & -\frac{\{c_0^\dagger, g_{\bar{k}}\}}{\sqrt{2}} & \{c_0^\dagger, g_q\} & 0 & \{c_0^\dagger, g_{\bar{q}}\} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{\frac{3}{2}}\{c_0^\dagger, g_{\bar{k}}\} & 0 & -\{c_0^\dagger, g_q\} & 0 & \{c_0^\dagger, g_{\bar{q}}\} \\ \sqrt{2}\{c_0^\dagger, g_0\} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{\{c_0^\dagger, g_{\bar{k}}\}}{\sqrt{2}} & \sqrt{\frac{3}{2}}\{c_0^\dagger, g_{\bar{k}}\} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \{c_0^\dagger, g_q\} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\{c_0^\dagger, g_q\} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \sqrt{2}\{c_0^\dagger, g_0\} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{\{c_0^\dagger, g_{\bar{k}}\}}{\sqrt{2}} & \sqrt{\frac{3}{2}}\{c_0^\dagger, g_{\bar{k}}\} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \{c_0^\dagger, g_{\bar{q}}\} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \{c_0^\dagger, g_{\bar{q}}\} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (2.15)$$

3 | Resultados

3.1 | Condutância para $w = 0$

Os resultados para a defasagem de altas temperaturas estão contidos na figura 10. Eles estão de acordo com a previsão feita na tabela 1, mediante a soma de $\pi/2$, necessária para descrição em baixas temperaturas. Fica claro que o efeito do parâmetro de hibridização V é de misturar os estados de ordem zero de perturbação, tornando a transição entre cada domínio $\langle n_d \rangle$ do ponto quântico, mais suave. Na parte esquerda da figura 11, vemos o mesmo padrão. A condutância como função de V_g/U é mostrada na parte direita da figura 11, para diversos

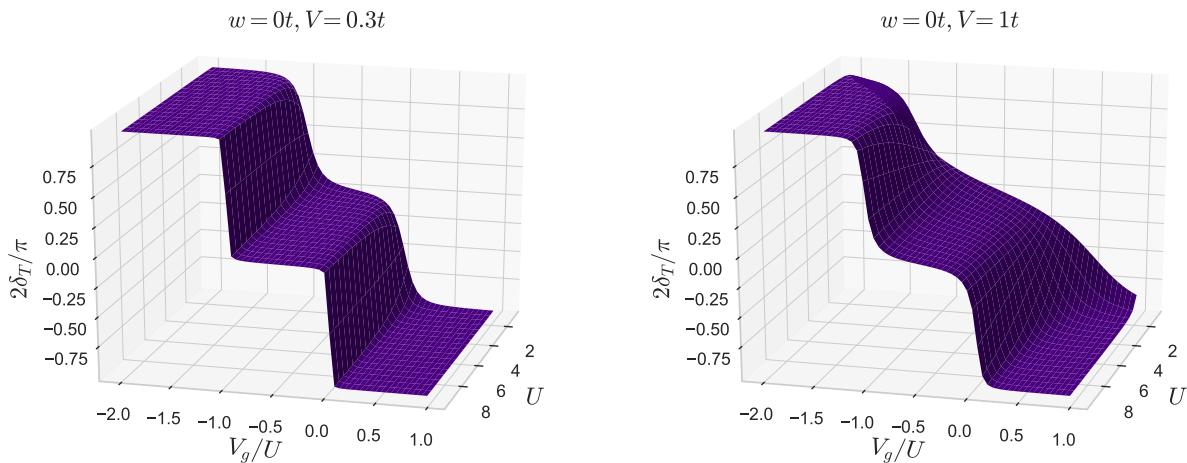


Figura 10 – Comparação da defasagem para diferentes valores de V .
Fonte: Elaborada pela autora.

valores de V . Como esperado, a condutância assume valores balísticos longe do ponto simétrico e vai a zero à medida que nos aproximamos do regime Kondo. Nele, o forte acoplamento entre os elétrons do fio e do ponto quântico acumula cargas na região central do fio, e, consequentemente, impede o transporte. Dessa forma, vemos o característico vale Kondo na condutância.

A transformação partícula-buraco no Hamiltoniano de Anderson, Eq. 1.9, leva V_g em $-(V_g + U)$. Por conseguinte, ela leva um ponto no eixo V_g/U em seu oposto em torno de $V_g/U = -0.5$. Como para $w = 0$ a defasagem se relaciona com $\langle n_d \rangle$, ela é levada de $\delta_0 \rightarrow \pi - \delta_0$, o que não afeta a condutância. Dessa forma, esta é simétrica em torno de $V_g = -2U$, como observado.

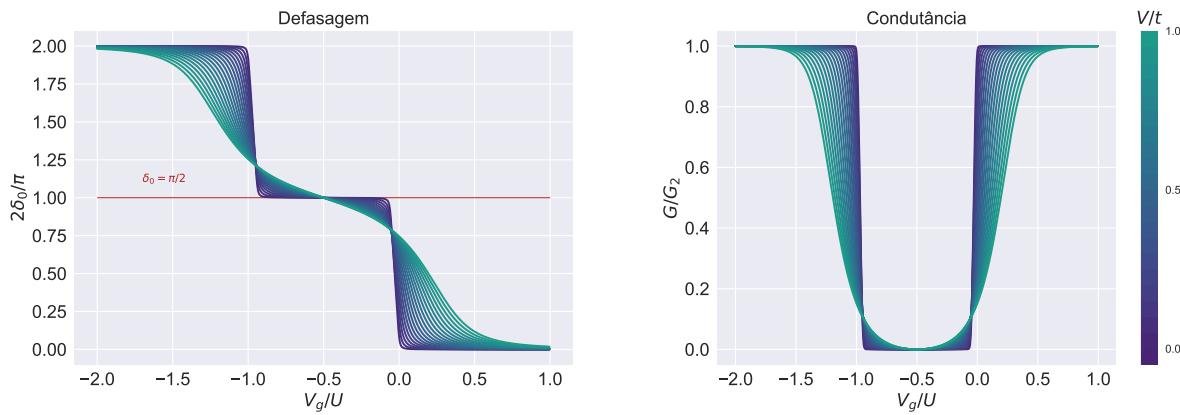


Figura 11 – Comparação da defasagem de baixas temperaturas e condutância para diferentes valores de V . Neste caso, $U = 2t$ e $w = 0$.
Fonte: Elaborada pela autora.

3.2 | O efeito do potencial espalhador

Para $w \neq 0$, o dispositivo é marcado pela interferência entre dois possíveis caminhos de condução: pelo fio e pelo ponto quântico. Neste caso, a carga extra induzida no fio não é mais apenas devido à blindagem do ponto quântico, mas é também causada pelo potencial de espalhamento w . Como consequência, as curvas de defasagem são deslocadas para baixo ($w > 0$), como mostra o lado esquerdo da figura 12. A linha vermelha onde $\delta_0 = \pi/2$ mostra os pontos nos quais a condutância é nula, o que ocorre para $V_g \approx -U$. Quando $w < 0$, as cargas positivas induzidas pelo potencial deslocam a defasagem para cima, fazendo com que o ponto de condutância nula seja $V_g \approx 0$.

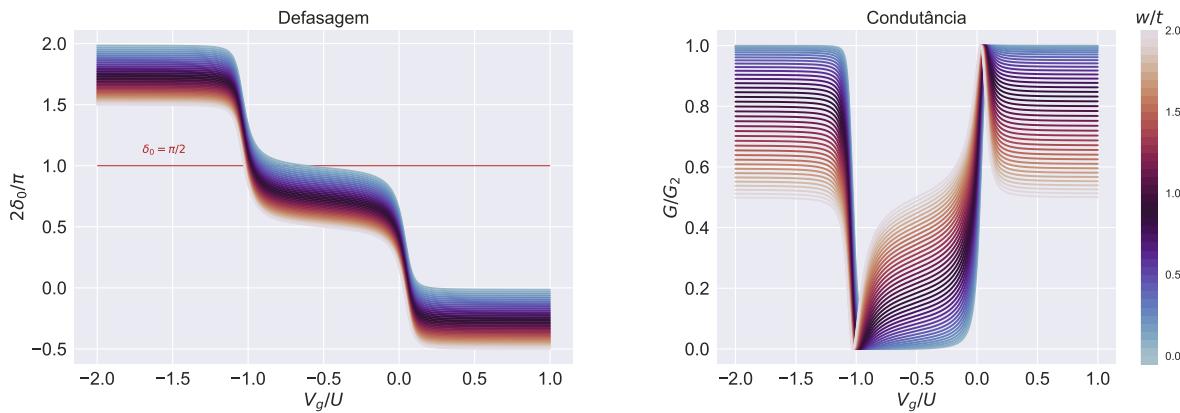


Figura 12 – Comparação da defasagem e condutância para diferentes valores de w . Aqui, $U = 6t$ e $V = 0.7t$.
Fonte: Elaborada pela autora.

O lado direito da figura 12 mostra o efeito do deslocamento das defasagens na condutância.

Assim nota-se que pequenos potenciais w afetam-na significativamente. Além disso, à medida que o potencial aumenta, a condutância do vale Kondo sobe, mas como esperado, existe um ponto onde ela se anula. Por fim, a figura 13 mostra a assimetria causada pelo potencial. Aqui, a discussão de simetria da seção anterior deixou de ser válida pois a relação entre número de ocupação na impureza e defasagem se tornou mais complexa.

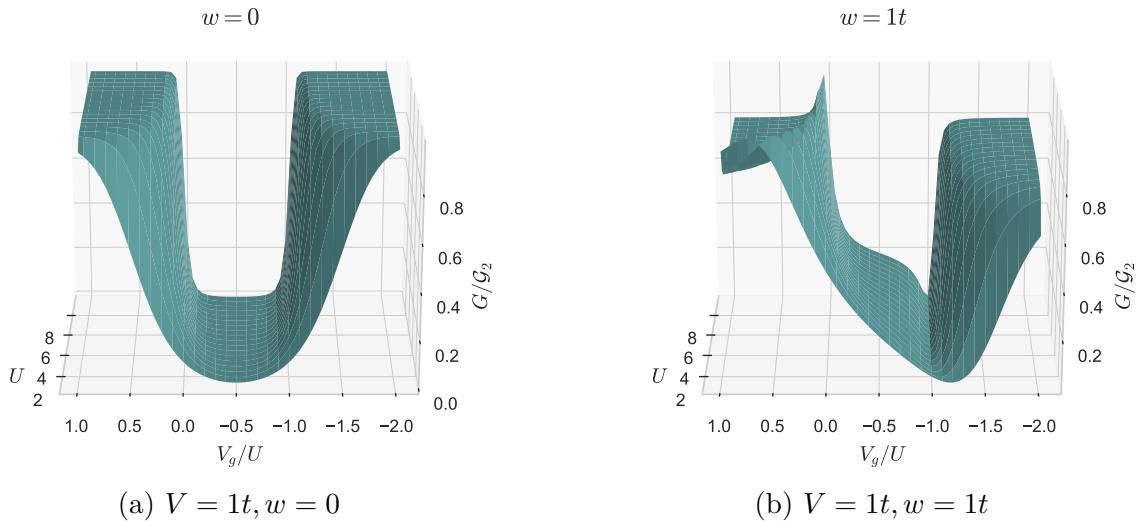


Figura 13 – Comparação da condutância para diferentes valores de w .

Fonte: elaborada pela autora.

3.3 | Comparação com NRG

O método Numérico do Grupo de Renormalização (NRG) produz resultados essencialmente exatos, e fornece um teste para nossa abordagem. No lado esquerdo da figura 14, temos uma comparação entre a condutância por Hartree-Fock e por NRG. Embora os comportamentos qualitativos dos gráficos sejam similares, os valores de condutância diferem muito. Para os mesmos parâmetros, o lado direito da figura 14 compara o resultado perturbativo com o NRG. Ainda que a descrição falhe longe do ponto simétrico, a concordância é clara não só em torno deste, mas também quando nos aproximamos de outros regimes de ocupação no ponto quântico ($V_g = 0, -U$).

Hartree-Fock não consegue retratar a mudança na condutância na presença do potencial espalhador, por isso, sua comparação com NRG não é mostrada. Para $w \neq 0$, o cálculo perturbativo produz resultados semelhantes ao do NRG, como mostra a figura 15. Longe do ponto simétrico as condutâncias não coincidem, mas em torno dele temos uma boa descrição.

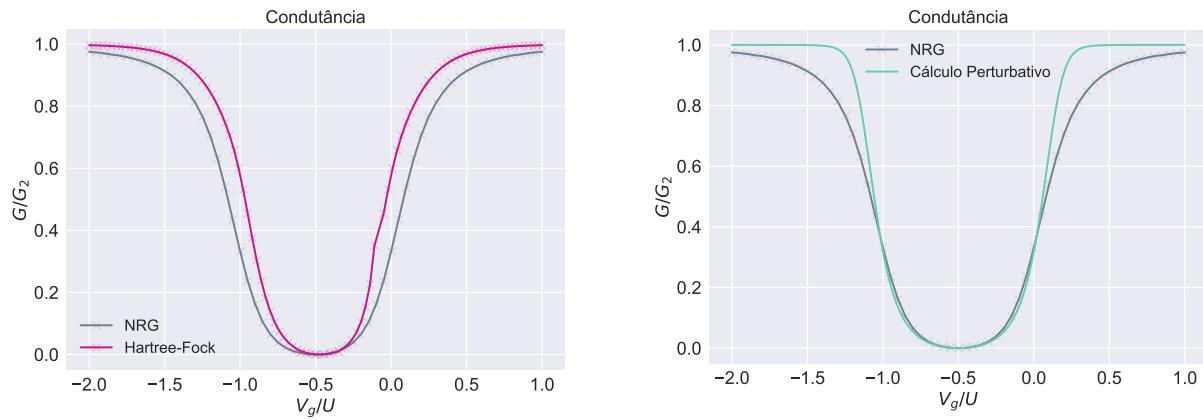


Figura 14 – Comparação da condutância em diferentes técnicas de muitos corpos para $U = 10t$, $V = 2t$ e $w = 0$. Os resultados por NRG foram elaborados pelo grupo de pesquisa.

Fonte: Elaborada pela autora.

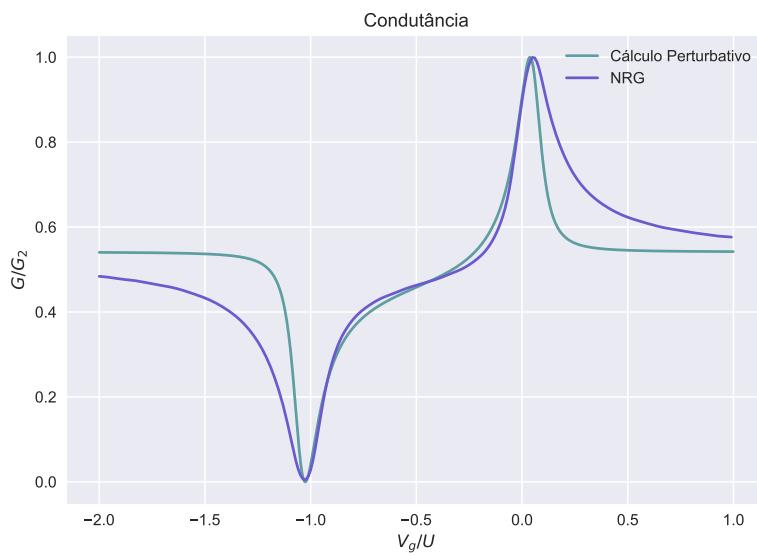


Figura 15 – Comparação da condutância obtida pelo cálculo perturbativo e por NRG, para $V = 1t$, $U = 9t$, $w = 1.84t$.

Fonte: Elaborada pela autora.

4 | Conclusão

Atualmente, o efeito Kondo é um problema bem definido, explicado há muito tempo. Por sua física ser conhecida e difícil de se capturar, ele se torna um candidato natural para o teste de eficácia de novas abordagens à problemas de muitos corpos. Além disso, tem-se como algo estabelecido na literatura que métodos perturbativos e variacionais não funcionam para descrevê-lo. No entanto, é interessante que a Teoria do Funcional da Densidade (DFT) possa ser aplicada, pois ela permite cálculos de primeiros princípios, que retratam melhor os materiais.

Nesta monografia, estudamos um fio quântico lateralmente acoplado a um ponto quântico via teoria da perturbação de primeira ordem no termo de hibridização do Hamiltoniano de Anderson. Sabendo que não teríamos sucesso neste cálculo para temperaturas menores que a temperatura Kondo, encontramos a defasagem de altas temperaturas ($T \gg T_k$) do fio. Em seguida, obtivemos a defasagem de baixas temperaturas mediante uma soma de $\pi/2$, que está associada à blindagem da impureza magnética.

Os resultados obtidos para a condutância com esse cálculo simples foram satisfatórios, principalmente em torno do ponto simétrico. Por capturar a física do efeito Kondo, considera-se que a transição para baixas temperaturas foi bem sucedida, dentro das aproximações consideradas. A abordagem explorada pode ser equivalentemente aplicada à DFT. Dessa forma, partindo de DFT no ponto fixo de altas temperaturas do Hamiltoniano de Anderson, é possível descrever o sistema a baixas temperaturas.

Referências

- 1 KOBAYASHI, K. et al. Fano resonance in a quantum wire with a side-coupled quantum dot. **Phys. Rev. B**, American Physical Society, v. 70, p. 035319, Jul 2004. Citado na página 7.
- 2 SATO, M. et al. Observation of the fano-kondo anti-resonance in a quantum wire with a side-coupled quantum dot. **Physical review letters**, v. 95, p. 066801, 09 2005. Citado na página 7.
- 3 ANDERSON, P. W. Localized magnetic states in metals. **Phys. Rev.**, American Physical Society, v. 124, p. 41–53, Oct 1961. Citado na página 8.
- 4 SCHRIEFFER, J. R.; WOLFF, P. A. Relation between the anderson and kondo hamiltonians. **Phys. Rev.**, American Physical Society, v. 149, n. 2, p. 491–492, 1966. Citado na página 9.
- 5 KONDO, J. Resistance minimum in dilute magnetic alloys. **Progr. Theor. Phys.**, v. 32, n. 1, p. 37–49, 1964. Citado na página 9.
- 6 WILSON, K. G. The renormalization group: Critical phenomena and the kondo problem. **Rev. Mod. Phys.**, American Physical Society, v. 47, p. 773–840, Oct 1975. Citado na página 9.
- 7 ANDREI, N.; FURUYA, K.; LOWENSTEIN, J. H. Solution of the kondo problem. **Rev. Mod. Phys.**, American Physical Society, v. 55, p. 331–402, Apr 1983. Citado na página 9.
- 8 TSVELICK, A.; WIEGMANN, P. Exact results in the theory of magnetic alloys. **Advances in Physics**, Taylor & Francis, v. 32, n. 4, p. 453–713, 1983. Citado na página 9.
- 9 LANGRETH, D. C. Friedel sum rule for anderson's model of localized impurity states. **Phys. Rev.**, American Physical Society, v. 150, n. 2, p. 516–518, 1966. Citado na página 11.
- 10 SERIDONIO, A. C.; YOSHIDA, M.; OLIVEIRA, L. N. Universal zero-bias conductance through a quantum wire side-coupled to a quantum dot. **Phys. Rev. B**, v. 80, p. 235318, 2009. Citado na página 12.

