

TESIS
CARRERA DE DOCTORADO EN FÍSICA

Efectos de muchos cuerpos en sistemas nanoscópicos y de fermiones pesados

Alejandro Martín Lobos

Director: Dr. Armando A. Aligia

Instituto Balseiro
Comisión Nacional de Energía Atómica
Universidad Nacional de Cuyo

Julio 2007

Resumen

El efecto Kondo es un fenómeno que surge de la interacción entre una impureza magnética y los electrones de conducción de un metal. Este problema constituye un ejemplo de la física de muchos cuerpos en materia condensada, y para resolverlo satisfactoriamente se debieron desarrollar métodos que tuvieran en cuenta la enorme cantidad de grados de libertad en interacción. Los avances tecnológicos y las técnicas de fabricación de materiales desarrollados en las últimas décadas le han dado una nueva perspectiva al problema de Kondo original, lo que constituye un desafío desde el punto de vista teórico, ya que los modelos y métodos tradicionales deben adaptarse convenientemente para tratar estas nuevas situaciones.

En esta tesis nos concentramos en el estudio del efecto Kondo en sistemas de valencia intermedia de Yb (yterbio) y en sistemas nanoscópicos, dentro del marco del modelo de impureza de Anderson. Para ello utilizamos extensiones o modificaciones al método de bosones esclavos en campo medio, el método variacional, aproximaciones al método conocido como NCA, e implementamos mapeos a modelos efectivos de impureza. En la primera parte de la tesis se muestra el estudio de las propiedades termodinámicas de los compuestos $\text{Yb}_2\text{M}_3\text{Ga}_9$ ($\text{M}=\text{Rh},\text{Ir}$) y $\text{Yb}_3\text{Ni}_5\text{Al}_{19}$, recientemente sintetizados. Pudimos caracterizar estos compuestos como de valencia mixta, es decir, que presentan fuertes correlaciones y fluctuaciones de la valencia $4f$, y simultáneamente, importantes efectos de campo cristalino. Luego presentamos un estudio de impurezas magnéticas en nanoestructuras conocidas como corrales cuánticos. El efecto Kondo en estos sistemas ha sido observado experimentalmente como una antiresonancia de Fano en los espectros obtenidos con un microscopio de efecto túnel (STM). Calculamos teóricamente la señal de conductancia túnel diferencial dI/dV que se obtendría en un corral cuántico circular con un átomo de Co (cobalto), que actúa como impureza magnética, en diferentes posiciones dentro del corral. Finalmente presentamos un estudio de la conductancia electrónica a través de arreglos de puntos cuánticos acoplados en diversas configuraciones, y analizamos el efecto de las correlaciones en el régimen de Kondo. Los resultados obtenidos muestran que la conductancia a través de anillos de Aharonov-Bohm formados por puntos cuánticos, incluyendo efectos de la interacción spin-órbita de Rashba, presenta importantes efectos de interferencia y polarización de spin magnificada por las correlaciones.

Palabras clave: electrones fuertemente correlacionados, efecto Kondo, valencia intermedia, sistemas nanoscópicos.

Abstract

The Kondo effect is a phenomenon resulting from the interaction between a magnetic impurity and the conduction-band electrons in a metallic host. This problem is a prototypical example of many-body physics in condensed matter, and its resolution required the development of new theoretical methods in order to account for the huge quantity of interacting degrees of freedom. Recent advances in nanotechnology and fabrication techniques provided new perspectives for the original formulation of the Kondo problem. This constitutes a theoretical challenge, since traditional models and methods have to be adapted for new situations.

In this thesis, we concentrate in the study of the Kondo effect in Yb mixed-valence and nanoscopic systems, within the framework of the impurity Anderson model. To this end, we use extensions or modifications of the slave-bosons technique in the mean-field approximation, the variational method, approximations to the NCA method, and mappings to effective impurity models. In the first part of this thesis we study the thermodynamical and dynamical properties of the recently synthesized compounds $\text{Yb}_2\text{M}_3\text{Ga}_9$ ($\text{M}=\text{Rh},\text{Ir}$) and $\text{Yb}_3\text{Ni}_5\text{Al}_{19}$. We could classify these compounds as mixed-valence, presenting strong $4f$ -valence fluctuations and correlations, and simultaneously showing important crystal-field effects. We then present a study of magnetic impurities in quantum corrals. The Kondo effect has been detected in these systems as a sharp Fano lineshape in the STM spectra. We theoretically calculate the dI/dV signal of an STM which would be observed in experiments made on a circular quantum corral with a Co atom inside acting as a magnetic impurity, for different positions within the corral. Finally we present a study of the conductance through a cluster of interacting quantum-dots, coupled in different configurations, and analyze the effects of correlations in the Kondo regime. The results for the conductance through Aharonov-Bohm rings of quantum-dots, including the effects of a Rashba spin-orbit coupling, show important interference effects and spin polarization enhancement due to correlations.

Keywords: strongly correlated electrons, Kondo effect, mixed-valence, nanoscopic systems.

Índice general

1	Introducción	1
1.1	Breve reseña cronológica	2
1.1.1	El problema de la impureza de Kondo	2
1.1.2	El problema de la red de Kondo	8
1.2	El efecto Kondo en sistemas nanoscópicos	10
1.3	Organización de esta tesis	12
2	Propiedades físicas de compuestos de valencia intermedia	13
2.1	Introducción	13
2.2	El método del desarrollo en $1/N$	14
2.3	La aproximación autoconsistente NCA (“ <i>Non Crossing Approximation</i> ”)	20
2.3.1	Cálculo de propiedades físicas mediante la NCA	21
2.4	Soluciones aproximadas de la NCA	25
2.4.1	Formalismo variacional	25
2.4.2	Cálculo de propiedades a $T = 0$	27
2.4.3	Cálculo de propiedades a $T > 0$	35
2.4.4	Susceptibilidad estática y dinámica a $T > 0$	38
2.5	Comparación con resultados experimentales	39
2.5.1	Susceptibilidad estática	39
2.5.2	Dispersión inelástica de neutrones en $\text{Yb}_2\text{Rh}_3\text{Ga}_9$	44
2.5.3	Valencia $n_f(T)$ vs T en $\text{Yb}_2\text{X}_3\text{Ga}_9$ ($\text{X}=\text{Rh},\text{Ir}$)	48
2.5.4	Constante $\gamma = C/T$	50
2.6	Resumen y conclusiones	50
3	Impurezas magnéticas en corrales cuánticos	51
3.1	Introducción	51
3.2	El método de bosones esclavos	53
3.2.1	La aproximación “ <i>saddle-point</i> ” o de punto de ensilladura	56
3.2.2	La aproximación de punto de ensilladura en el problema de la impureza de Anderson con $U \rightarrow \infty$	57
3.2.3	Interpretación física de la aproximación de punto de ensilladura	60
3.2.4	Formulación de Kotliar y Ruckenstein para U finito	61
3.3	Modelo para una impureza magnética en una superficie nanoestructurada	63

3.3.1	Estados confinados en un corral circular	64
3.3.2	Método de bosones esclavos en campo medio.	68
3.4	Cálculo de la conductancia túnel	69
3.5	Resultados	71
3.5.1	Cálculo de $\Delta dI/dV$ en función del voltaje en la superficie limpia . . .	71
3.5.2	Cálculo de $\Delta dI/dV$ en función del voltaje dentro del corral	73
3.6	Resumen y conclusiones	76
4	Conductancia a través de arreglos de puntos cuánticos	79
4.1	Introducción	79
4.2	Modelo para un arreglo de puntos cuánticos interactuantes	80
4.2.1	Modelo para $N_d = 3$ puntos cuánticos	80
4.2.2	Aproximación de un sitio efectivo	82
4.3	Cálculo de la conductancia	87
4.4	Resultados	88
4.4.1	Conductancia a través de 1 punto cuántico	88
4.4.2	Conductancia a través de 3 puntos cuánticos	90
4.5	Validez de la aproximación	95
4.6	Resumen y conclusiones	97
5	Efectos de interferencia en anillos de Hubbard	99
5.1	Introducción	99
5.2	Modelo “ <i>tight-binding</i> ” para un anillo no interactuante	100
5.3	Modelo para un anillo interactuante	103
5.3.1	Aproximaciones	104
5.4	Cálculo de la conductancia	106
5.5	Resultados	107
5.5.1	Conductancia en el régimen no magnético. Comparación con otros métodos	109
5.5.2	Conductancia en el régimen de Kondo y de valencia intermedia	112
5.5.3	Efectos de la interacción spin-órbita Rashba	114
5.5.4	Efectos de las interacciones en el transporte polarizado en spin	116
5.6	Resumen y conclusiones	118
6	Resumen y conclusiones generales	119
	Apéndices	123
A	Desarrollo en $1/N$	123
A.1	Regla de Suma	123
A.2	Cálculo de propiedades con la NCA aproximada	124
A.3	Cálculo Variacional	126
A.3.1	Densidad de estados $\rho_f(\omega)$	127
A.4	Ecuaciones NCA aproximadas	130

B	Método de bosones esclavos	133
B.1	Formulación de Coleman	133
B.1.1	Modelo de Anderson	133
B.1.2	Modelo de Anderson efectivo ($N_d = 4$)	135
B.2	Formulación de Kotliar y Ruckenstein	137
B.2.1	Modelo de Anderson	137
B.2.2	Modelo de Anderson efectivo (caso $N_d = 3$)	140
C	Transformación de gauge para una partícula de $S = 1/2$ con interacción spin-órbita de Rashba en un anillo 1D	147
	Bibliografía	151
	Agradecimientos	159
	Publicaciones	161

Capítulo 1

Introducción

La gran variedad de propiedades que exhiben los electrones en metales es una consecuencia de la enorme cantidad de grados de libertad interactuantes. Sin embargo, a pesar de esta complejidad, sólo un reducido número de estados fundamentales electrónicos cualitativamente diferentes se producen en la naturaleza, entre los cuales podemos mencionar a los líquidos de Fermi, compuestos magnéticamente ordenados y a los superconductores [1]¹. En las últimas décadas, el avance en las técnicas de fabricación de nuevos materiales, ha generado una serie de compuestos con propiedades inusuales. Para poder comprender las propiedades de estos nuevos materiales, la determinación experimental de su estado fundamental y el desarrollo de modelos que den cuenta de éste, son esenciales. En este sentido, los metales que contienen impurezas magnéticas diluidas o aleaciones concentradas de éstas han ocupado la atención de la comunidad científica por más de 50 años. Una de las razones por las cuales han atraído tanto interés es que cuando un ión que exhibe un momento magnético bien definido al estar aislado es introducido en un metal, intuitivamente se espera que su estado fundamental también muestre propiedades magnéticas, por ejemplo, una ley de Curie para la susceptibilidad magnética $\chi(T) = c/T$, entre otras propiedades. Sin embargo, este no es el caso en general: una gran variedad de metales de transición (serie 3d), lantánidos (serie 4f) y actínidos (serie 5f), exhiben, efectivamente, una susceptibilidad Curie a altas temperaturas, pero a medida que baja la temperatura del sistema, ésta tiende a un comportamiento tipo Pauli ($\chi(T) = \text{cte}$), lo que es una fuerte indicación de que el estado fundamental es un líquido de Fermi. ¿Cómo es posible que se produzca un cambio tan drástico en el magnetismo? Para poder explicar este comportamiento, los modelos más sencillos posibles deben considerar los efectos de las interacciones entre los electrones, inducidas por las interacciones que existen dentro de la impureza magnética. Esto transforma al problema en un *problema de muchos cuerpos*, es decir, ya no es posible considerar a la impureza esencialmente aislada, con algunas correcciones introducidas por el entorno (electrones de conducción del metal), sino que es necesario resolver el problema de la impureza y los electrones de conducción *simultáneamente*. Este hecho demoró la llegada de una solución satisfactoria al problema de la impureza hasta los años '70.

¹Un intenso esfuerzo de investigación se realiza actualmente para producir materiales con nuevos y exóticos tipos de estados fundamentales, entre los que se encuentran los *no líquidos de Fermi* (“*non-Fermi liquids*”)

La formación de un estado fundamental no-magnético, tipo líquido de Fermi, a partir de la inclusión de impurezas magnéticas en un metal es conocida comúnmente como *efecto Kondo*, en honor a uno de los primeros físicos teóricos en contribuir a su entendimiento. Por extensión, también se llama así a la formación de un estado fundamental tipo líquido de Fermi en sistemas concentrados, aunque la naturaleza del estado fundamental en este caso es muy diferente.

Recientemente, el avance en la fabricación de sistemas de tamaño mesoscópico y nanoscópico permitió mostrar evidencias de la física del efecto Kondo en circuitos con *puntos cuánticos* realizados en semiconductores [2, 3, 4], y también en experimentos de microscopía de efecto túnel [5, 6, 7].

Debido a la importancia que ha tenido el problema de Kondo en la física de la materia condensada (que entre otros avances, mereció el otorgamiento del premio Nobel a K. Wilson en 1982 por el desarrollo del método conocido como *Grupo de Renormalización Numérico*), a continuación expondremos brevemente una sucesión cronológica de los avances y descubrimientos fundamentales de este tema.

1.1 Breve reseña cronológica

1.1.1 El problema de la impureza de Kondo

Los primeros experimentos que evidenciaron la presencia de propiedades anómalas a bajas temperaturas en metales con impurezas fueron mediciones de resistividad en aleaciones de metales nobles (Au, Ag, etc.) con pequeñas cantidades de metales de transición (Cu, Mn, etc.), a mediados de los años '30 [8]. En estas mediciones la anomalía se presentaba como un mínimo en la resistividad en función de T , que no podía ser explicada mediante la ley de Mathiessen [9]

$$\varrho(T) = \varrho_0 + AT^5 + \dots \quad (1.1)$$

que describe aproximadamente la resistividad de un metal como una suma de contribuciones de distinto origen: ϱ_0 es la contribución constante del *scattering* con impurezas (no magnéticas) a la resistividad y el segundo término es la contribución de los fonones.

En 1964, J. Kondo demostró que el mínimo en la resistividad tenía su origen en la dispersión magnética introducida por las impurezas de los metales de transición [10]. El modelo utilizado era el llamado *hamiltoniano de intercambio s-d*, o como se lo llamó posteriormente, *hamiltoniano de Kondo*, aunque en realidad fue introducido por Zener en 1951 [11]

$$H_{s-d} = H_{band} + H_{exch}, \quad (1.2)$$

$$H_{band} = \sum_{\sigma, \vec{k}} \epsilon_{\vec{k}} c_{\vec{k}, \sigma}^{\dagger} c_{\vec{k}, \sigma}, \quad (1.3)$$

$$H_{exch} = -2\mathcal{J}_K \vec{S} \cdot \vec{s}(\vec{r}), \quad (1.4)$$

donde H_{band} es el término de energía cinética de los electrones de la banda de conducción y H_{exch} es la parte de intercambio, donde $\mathcal{J}_K < 0$ es la constante de intercambio antiferromagnética, \vec{S} es el spin de la impureza y $\vec{s}(\vec{r})$ es la densidad de spin de los electrones

de conducción en el sitio \vec{r} (el sitio de la impureza corresponde a $\vec{r} = 0$). Mediante un cálculo perturbativo a tercer orden en \mathcal{J}_K , Kondo pudo demostrar que el *scattering* electrónico producido por los grados de libertad magnéticos en la impureza explica el mínimo en la resistividad. En su cálculo, la resistividad diverge como $\sim \ln k_B T/D$, donde D es el ancho de la banda de conducción.

Un modelo alternativo para impurezas magnéticas había sido propuesto por P. W. Anderson en 1961 [12]

$$H_A = H_{band} + H_{imp} + H_{mix}, \quad (1.5)$$

$$H_{imp} = \epsilon_d \sum_{\sigma} n_{d\sigma} + U n_{d\uparrow} n_{d\downarrow}, \quad (1.6)$$

$$H_{mix} = \sum_{\vec{k}\sigma} V_{\vec{k}} c_{\vec{k},\sigma}^{\dagger} d_{\sigma} + \text{H.c.}, \quad (1.7)$$

donde H_{band} es igual que antes y, a diferencia del hamiltoniano de Kondo, los grados de libertad de carga en la impureza están descriptos explícitamente: el operador $d_{\sigma}^{\dagger}(d_{\sigma})$ crea (destruye) un electrón en la impureza, con spin σ y energía ϵ_d . En este modelo, la impureza consta de un sólo nivel y las interacciones electrónicas están incluidas a nivel local mediante el término repulsivo $U > 0$. El término H_{mix} describe los procesos en los que el electrón “salta” de la banda de conducción a la impureza y viceversa. El modelo de Anderson es más fundamental que el modelo de Kondo, ya que describe microscópicamente todos los grados de libertad electrónicos.

Empleando una aproximación de campo medio, y suponiendo a los acoplamientos $V_{\vec{k}}$ independientes de \vec{k} y una banda de conducción con densidad de estados ρ_c constante, Anderson demostró que, en función del parámetro $U/\pi\Gamma$, donde $\Gamma = \pi\rho_c V^2$, existe un régimen en el que la impureza desarrolla un momento localizado. Este resultado, a pesar de sugerir correctamente la existencia de régimen de momento local no compensado, es erróneo en el sentido que predice la ruptura de la simetría $SU(2)$ en la impureza, algo que puede ocurrir solamente si el número de grados de libertad es infinito como, por ejemplo, en el modelo de Heisenberg, que correctamente predice la aparición de orden magnético por debajo de la temperatura crítica [13, 14].

En 1966 Schrieffer y Wolff, utilizando una transformación canónica, demostraron que el hamiltoniano de Kondo (Ec. (1.2)) puede obtenerse a partir del de Anderson cuando $\epsilon_d \ll E_F$ donde E_F es la energía de Fermi y $\Gamma \ll |\epsilon_d|, U$, es decir, cuando la carga en la impureza es $\simeq 1$ y cuando la dinámica de este grado de libertad está “congelada” porque cuesta mucha energía sacar o poner otro electrón [15]. En estas condiciones, sólo puede haber dinámica en los spines, y como resultado se obtiene un modelo de spines (hamiltoniano de Kondo). Con esta transformación, el valor de la constante \mathcal{J}_K se vincula con los parámetros del modelo de Anderson de la forma

$$\mathcal{J}_K = 2V^2 \frac{U}{\epsilon_d(\epsilon_d + U)} \approx 2 \frac{V^2}{\epsilon_d} < 0. \quad (1.8)$$

Luego de establecer esta correspondencia, los esfuerzos se centraron en remover las divergencias logarítmicas obtenidas mediante perturbaciones en el cálculo original de Kondo. En

1965, Abrikosov llevó a cabo una suma infinita de los términos divergentes más importantes, llamados *diagramas de parquet*, utilizando una representación fermiónica de los operadores de spin del hamiltoniano de Kondo, sujetos al vínculo de ocupación fermiónica igual a 1 en la impureza (para eliminar estados sin sentido físico) [16]. Abrikosov obtuvo para la susceptibilidad la expresión

$$\chi(T) = \frac{(g\mu_B)^2 S(S+1)}{3k_B T} \left[1 - \frac{2\mathcal{J}_K \rho_c}{1 + 2\mathcal{J}_K \rho_c \ln(k_B T/D)} + \mathcal{O}(\mathcal{J}_K \rho_c)^2 \right]. \quad (1.9)$$

Los términos logarítmicos están ahora en el denominador, ya que la suma infinita en potencias de $\mathcal{J}_K \rho_c \ln(k_B T/D)$ se puede expresar exactamente como una suma geométrica. Esto muestra claramente que cuando $\mathcal{J}_K > 0$ (caso ferromagnético), la contribución de la interacción tiende asintóticamente a cero cuando $T \rightarrow 0$, obteniéndose una ley de Curie correspondiente a la impureza libre. Sin embargo, para el caso antiferromagnético ($\mathcal{J}_K < 0$), las correcciones divergen a la temperatura

$$k_B T_K \approx D e^{-1/(2\rho_c |\mathcal{J}_K|)}, \quad (1.10)$$

que llamaremos *temperatura de Kondo*. Todas las otras propiedades físicas calculadas con este esquema divergen a esta temperatura, lo que invalida este método. Esto llevó a los físicos a preguntarse si las divergencias desaparecerían si se consideraba una suma completa de diagramas de parquet. Suhl, en 1965 propuso llevar a cabo esta suma mediante ecuaciones integrales acopladas de estos diagramas [17]. Algo que genera la misma serie es el método de desacople de las ecuaciones de movimiento de la función de Green, llevado a cabo por Nagaoka en 1965 [18]. Este método soluciona las divergencias en $T = T_K$ y puede ser continuado hasta $T = 0$, pero no es satisfactorio en el sentido de que las propiedades calculadas dependen fuertemente de las condiciones iniciales, dando un gran rango de posibles resultados a $T = 0$ para el caso $S = 1/2$, obteniéndose estados fundamentales con diferente valor del spin total. Esto contrasta con un teorema general de Mattis, que establece que la simetría de spin del estado fundamental para $\mathcal{J}_K < 0$ en un sistema de volumen finito corresponde a $S - 1/2$ [19]. Esto implica que para el caso $S = 1/2$, la impureza debía estar completamente apantallada a $T = 0$, explicando naturalmente una susceptibilidad constante a bajas temperaturas.

En 1966, Yosida introdujo una función de onda variacional para estudiar el comportamiento del sistema a $T = 0$ [20]

$$|\Psi_{s,t}\rangle = \sum_{k > k_F} \alpha_{\vec{k}} \left(c_{\vec{k},\downarrow}^\dagger |\uparrow\rangle \pm c_{\vec{k},\uparrow}^\dagger |\downarrow\rangle \right) |FS\rangle, \quad (1.11)$$

donde los parámetros variacionales $\alpha_{\vec{k}}$ deben ser elegidos de manera de minimizar la energía, y donde $|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle$ son los estados de spin de la impureza con $S = 1/2$. $|FS\rangle$ es el mar de Fermi y k_F es el momento de Fermi. Esta función de onda tiene dos valores posibles para el spin total S_T , dependiendo del signo elegido: un singlete ($S_T = 0$) para el signo - y un triplete ($S_T = 1, S_T^z = 0$) para el signo +. La energía del estado fundamental se minimiza para $\mathcal{J}_K < 0$ con la elección de una función tipo singlete, lo que está de acuerdo con el teorema de Mattis, dando un valor $E_s = -D e^{-2/(3\rho_c |\mathcal{J}_K|)}$ y es comparable al valor de T_K dado por

la expresión de Abrikosov ². El método variacional permite investigar las propiedades del estado fundamental de un modo no perturbativo, por lo que se pudo describir correctamente las propiedades a $T = 0$. Cualitativamente, la función de onda variacional describe a una impureza completamente apantallada por los electrones de conducción.

Hacia fines de los '60 estaban bien establecidos los límites $T = 0$ y $T \gg T_K$. Sin embargo, la descripción detallada del cambio de comportamiento o “*crossover*” desde la impureza libre a altas temperaturas hasta una impureza completamente apantallada a $T = 0$ no se había logrado.

En 1970, Anderson, Yuval y Hamman [22] introdujeron el *método de escaleo* (“*scaling*”) en el hamiltoniano de Kondo, que está basado en conceptos del grupo de renormalización. El método de escaleo se basa en la eliminar progresivamente los grados de libertad de alta energía de la banda de conducción mediante una transformación canónica, y mapear el hamiltoniano original en otro con la misma forma pero con parámetros renormalizados. Para mantener la forma del hamiltoniano efectivo así obtenido, se deben desprestigiar contribuciones $\mathcal{O}(\mathcal{J}_K \rho_c)^3$, lo cual es posible siempre que estas contribuciones sean pequeñas. De esta manera demostraron que para una constante $\mathcal{J}_K < 0$ arbitrariamente chica, la constante renormalizada $\tilde{\mathcal{J}}_K$ crece indefinidamente a medida que $T \rightarrow 0$. Eventualmente, el método se hace inválido para $T < T_K$ a partir de donde ya no es posible desprestigiar términos $\mathcal{O}(\tilde{\mathcal{J}}_K \rho_c)^3$ en el hamiltoniano efectivo. Sin embargo, Anderson, Yuval y Hamman conjeturaron que si el proceso de escaleo pudiera seguirse hasta $T \rightarrow 0$, el acoplamiento alcanzaría el límite $\tilde{\mathcal{J}}_K \rightarrow \infty$. En este límite, la renormalización termina, y este límite se convierte en un “*punto fijo estable*”, en la terminología del grupo de renormalización. Esta fuerte interacción induciría un estado fundamental en el que el spin de la impureza estaría rígidamente acoplado a los spines de conducción y apantallado por éstos.

En 1974 K. Wilson introdujo el *Grupo de Renormalización Numérico*, que combina conceptos de renormalización con la capacidad de cálculo numérico de las computadoras actuales [23]. Al igual que el método de escaleo, el Grupo de Renormalización Numérico elimina progresivamente grados de libertad de alta energía, pero diagonaliza exactamente el hamiltoniano efectivo que se obtiene en cada etapa de la renormalización. Dado que es un método no perturbativo, permitió describir rigurosamente el *crossover* por primera vez. En efecto, el momento magnético efectivo en la impureza

$$\mu_{eff}^2 = 3T\chi(T), \quad (1.12)$$

tiende a cero cuando $T \rightarrow 0$.

En el año 1974, Nozières postuló que el estado fundamental en el problema de la impureza de Kondo podía ser interpretado como un *líquido de Fermi local* [24], obteniendo una expresión explícita para el hamiltoniano efectivo en la cercanía del punto fijo de acoplamiento fuerte. Nozières expuso su argumentación comenzando con una cadena unidimensional con la impureza magnética acoplada al sitio 0 en un extremo mediante el acoplamiento efectivo $\tilde{\mathcal{J}}_K$, como se ilustra en la Fig. 1.1. Utilizando el resultado obtenido con el Grupo de

²Como veremos más adelante, en 1976 Varma y Yafet propusieron una función de onda variacional para el modelo de Anderson [21]. La energía ganada por formar el estado fundamental singlete en este caso es exactamente igual a la expresión para T_K de la Ec.(1.10).

Renormalización Numérico a $T \rightarrow 0$, en el que $\tilde{J}_K \gg t$ (límite de acoplamiento fuerte) pudo demostrar que el estado fundamental del sistema correspondía a un singlete (*singlete de Kondo*) formado por los spines de la impureza y del sitio 0, desacoplado del resto de la cadena. Las funciones de onda dispersadas por la impureza, lejos de la misma, pueden ser descriptas como $\psi_\sigma(x) \approx \sin(k_F x - \delta_\sigma)$, donde δ_σ es un *corrimiento de fase* (“*phase-shift*”). Al estar desacoplado el sitio 0 en el límite $\tilde{J}_K \rightarrow \infty$, se verifica $\delta_\sigma = k_F a = \pi/2$, siendo a el parámetro de red. De esta forma, el singlete de Kondo actúa dispersando elásticamente los electrones de conducción como lo haría una esfera rígida. Por la regla de suma de Friedel [25], $\langle n_{0\sigma} \rangle = \delta_\sigma/\pi$, y usando que la simetría de spin del problema $\langle n_{0\uparrow} \rangle = \langle n_{0\downarrow} \rangle$ se sigue que el número total (spin “*up*” más “*down*”) de electrones de conducción ligados en el sitio de la impureza es 1. Considerando fluctuaciones virtuales al sitio 0, Nozières argumentó que la interacción inducida en el sitio 1 tendría la forma $H_{int} = t^4/\tilde{J}_K^3 n_{1\uparrow}n_{1\downarrow}$. Esta interacción repulsiva débil describe a un líquido de Fermi “local”.

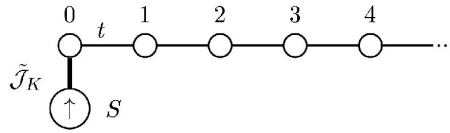


Figura 1.1: Esquema del sistema utilizado en los argumentos de Nozières, que representa a una cadena unidimensional acoplada a la impureza magnética.

En 1980, Andrei [26] y Wiegmann [27], independientemente, diagonalizaron exactamente el hamiltoniano de Kondo con relación de dispersión lineal usando un ansatz de Bethe y más tarde, Wiegmann [28] y Kawakami y Okiji [29], el hamiltoniano de Anderson. En este método, las propiedades termodinámicas se formulan en términos de una jerarquía infinita de ecuaciones integrales que se resuelven numéricamente. El acuerdo teórico con los resultados del grupo de renormalización numérico es excelente.

Aplicando el método de perturbaciones diagramáticas de la función de Green en la impureza en términos del parámetro U del hamiltoniano de Anderson, Yosida y Yamada en la década del '70 calcularon algunas propiedades en el modelo de Anderson simétrico, como la densidad espectral $\rho_d(\omega)$ [30, 31], y posteriormente, Horvatić, Šokčević y Zlatić en 1987 extendieron estos resultados para el caso sin simetría partícula-hueco [32]. Por su naturaleza perturbativa, el acuerdo cuantitativo de este método con los métodos exactos mencionados anteriormente se deteriora para valores de $U/\pi\Gamma > 2.5$ en general. Sin embargo, para valores moderados de este cociente, permite obtener una idea cualitativa adecuada de las propiedades del sistema.

Finalmente, por completitud, mencionamos los métodos conocidos como *métodos de partículas auxiliares* [33, 34, 35, 36] introducidos en los '80, pero dejamos su desarrollo para capítulos posteriores.

Además del comportamiento constante de la susceptibilidad magnética a baja temperaturas, otra de las características de la física del efecto Kondo es la aparición de una resonancia en la densidad espectral en la impureza $\rho_d(\omega)$ para $\omega \sim E_F$, cuando $T < T_K$. A esta resonancia se la denomina *resonancia de Kondo* o *resonancia de Abrikosov-Suhl*. Partiendo de

la solución de la impureza de Anderson $S = 1/2$ con $V = 0$, se esperan en principio 2 resonancias en la densidad de estados local $\rho_d(\omega)$: una resonancia que refleja la amplitud de las transiciones de $0 \rightarrow 1$ partícula a una energía $\omega = E_{n=1} - E_{n=0} = \epsilon_d$, y otra que se relaciona con las transiciones de $1 \rightarrow 2$ partículas, centrada en una energía $\omega = E_{n=2} - E_{n=1} = \epsilon_d + U$. En el límite $V \rightarrow 0$, el ancho de estas resonancias se obtiene calculando la probabilidad de transición por unidad de tiempo $1/\tau$ con la regla de oro de Fermi

$$\begin{aligned} \left(\frac{1}{\tau}\right)_{n=0 \rightarrow 1} &= \frac{2\pi}{\hbar} \sum \left| \langle \vec{k}; \sigma | H_{mix} | FS; 0 \rangle \right|^2 \delta(\epsilon_d - \epsilon_{\vec{k}}), \\ &= \frac{\Gamma}{\hbar} \end{aligned} \quad (1.13)$$

donde el estado inicial es un autoestado del modelo de Anderson con $V = 0$ que consta del mar de Fermi lleno y la impureza vacía $|FS; 0\rangle \equiv |FS\rangle \otimes |0\rangle$, y el estado final es un autoestado que consta de un hueco en mar de Fermi y un electrón en la impureza con proyección σ , $|\vec{k}; \sigma\rangle \equiv c_{\vec{k}, \sigma} |FS\rangle \otimes d_{\sigma}^{\dagger} |0\rangle$. Esto demuestra que las resonancias de $\rho_{d, \sigma}(\omega)$ que tienen que ver con añadir o quitar un electrón en la impureza quedan completamente descritas con la física de un cuerpo.

Sin embargo, la resonancia de Kondo es un efecto exclusivo de las correlaciones, y se origina en la estructura no trivial del estado fundamental de muchos cuerpos. Langreth demostró que el modelo de Anderson verifica la regla de suma de Friedel [37], lo que conduce a la fórmula

$$\rho_{d\sigma}(E_F) = \frac{\sin^2(\pi \langle n_{d\sigma} \rangle)}{\pi\Gamma}, \quad (1.14)$$

independiente del valor de la interacción U . En el caso del modelo de Anderson simétrico ($\epsilon_d = -U/2$), puede verificarse fácilmente que $\langle n_{d\uparrow} \rangle = \langle n_{d\downarrow} \rangle = 1/2$ independientemente del valor de U , lo que implica que $\rho_{d\sigma}(E_F) = 1/\pi\Gamma = \text{cte}$. Para el caso no interactuante $U = 0$, se espera una resonancia única en $\omega = \epsilon_d = E_F$. Aumentando lentamente U , los picos de carga centrados en $\epsilon_d = \pm U/2$ comienzan a alejarse del nivel de Fermi, pero por la regla de suma de Friedel, debe verificarse que $\rho_{d\sigma}(E_F) = 1/\pi\Gamma$, lo que implica que debe haber allí una resonancia. En el caso no simétrico, la resonancia se encuentra levemente desplazada respecto de E_F . ¿Cuál es el origen de esta resonancia? Para fijar ideas, supongamos un sistema de n electrones a $T = 0$, y tomemos para simplificar nuevamente el modelo de Anderson simétrico. En estas condiciones, la densidad de estados $\rho_{d\sigma}(\omega)$ para $\omega < 0$ es

$$\rho_{d\sigma}(\omega) = \sum_j \left| \langle \psi_j^{n-1} | d_{\sigma} | \Psi_0^n \rangle \right|^2 \delta(\omega + E_j^{n-1} - E_0^n) \quad (1.15)$$

donde $|\Psi_0^n\rangle$ y E_0^n son respectivamente el estado fundamental del sistema de n electrones y su energía, y donde E_j^{n-1} y $|\psi_j^{n-1}\rangle$ son las autoenergías y los autoestados del hamiltoniano de Anderson con una partícula menos que el fundamental. Supongamos que las energías E_0^n y E_j^{n-1} están referidas al nivel de Fermi E_F . Por la simetría partícula-hueco, la función es simétrica respecto de $\omega = E_F$. Esta fórmula nos dice que la resonancia cerca de $\omega = E_F$ se relaciona con el hecho de que $|\Psi_0^n\rangle$ se compone de estados con diferente ocupación en la

impureza, muy cercanos en energía a E_0^n . Es esta estructura no trivial del estado fundamental, con proyecciones no nulas en subespacios con distinto número de electrones en la impureza, la que origina la resonancia de Kondo cerca de E_F .

1.1.2 El problema de la red de Kondo

Aunque continúa siendo un campo de mucha actividad en la investigación actual, puede decirse que gracias al desarrollo del Grupo de Renormalización Numérico y de Bethe ansatz aplicados a los modelos de Kondo y de Anderson, el problema de la impureza ha sido esencialmente “resuelto”. Un nivel de dificultad cualitativamente diferente se encuentra aún sin resolución definitiva en el caso de los sistemas de aleaciones concentradas de iones magnéticos, formando lo que por extensión de lo anterior se denomina *red de Kondo*. Estos compuestos exhiben una serie inusual de propiedades como ser: superconductividad (p. ej: CeCu_2Si_2), orden magnético, paramagnetismo y comportamiento tipo líquido de Fermi, comportamiento tipo no-líquido de Fermi, etc [38]. Se ha catalogado a estos materiales genéricamente con el nombre de *fermiones pesados*, debido a que su masa efectiva derivada de, por ejemplo, el calor específico a bajas temperaturas, es varias veces superior a la del electrón libre.

Normalmente, los sistemas concentrados de momentos magnéticos desarrollan orden magnético a baja temperatura. El mecanismo responsable de este orden es precisamente el hamiltoniano de Kondo descrito en la Ec. (1.2): al introducir un momento magnético en el metal, éste polariza la nube electrónica alrededor suyo. Si un segundo momento magnético es introducido en las inmediaciones del primero, se acoplará con la densidad de spin generada por éste. Este mecanismo de interacción a distancia entre momentos magnéticos se denomina *interacción RKKY* [13, 39] y puede escribirse como

$$H_{RKKY} = \mathcal{J}_{RKKY}(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|)\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2, \quad (1.16)$$

donde la constante $\mathcal{J}_{RKKY}(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|) = -\mathcal{J}_K^2 \rho_c \cos(2k_F r) / |k_F r|^3$ se obtiene mediante un cálculo perturbativo a segundo orden en \mathcal{J}_K y r es la distancia entre iones magnéticos. Como puede verse, la interacción RKKY es de largo alcance y oscila con un período dado por k_F , por lo que puede inducir varios tipos de órdenes magnéticos, y en impurezas diluidas puede dar origen a comportamientos tipo *vidrio de spin* (“*spin-glass*”).

Recientemente, utilizando el método de la función de onda variacional, se ha encontrado evidencia teórica de un mecanismo de interacción entre dos impurezas de Kondo más fuerte inclusive que la interacción RKKY [40]. La interacción inducida por un estado variacional conocido como *doblete de Kondo* induce una correlación ferromagnética entre las dos impurezas que dominaría sobre los efectos de la interacción RKKY [40].

En 1975 Andres, Ott y Grabner descubrieron propiedades inusuales en el metal CeAl_3 [41], como ser: susceptibilidad Curie a altas temperaturas y susceptibilidad de Pauli a bajas temperaturas, con la consecuente falta de orden magnético, comportamiento lineal del calor específico con un coeficiente γ 1600 veces mayor al de un metal convencional y comportamiento cuadrático $\rho(T) \approx \alpha T^2$ en la resistividad a baja temperatura. Andres, Ott y Grebner señalaron que todas estos comportamientos indicaban la presencia de un líquido de Fermi.

Este descubrimiento llevó a S. Doniach [42, 43] a postular que este tipo inusual de metales era una versión concentrada del efecto Kondo de la impureza. Cualitativamente, Doniach argumentó que la naturaleza del estado fundamental electrónico estaba dado por una competencia de energías: la escala de energía $\mathcal{J}_{RKKY} \approx \mathcal{J}_K^2 \rho_c$ y la temperatura de Kondo $T_K \approx D e^{-1/2 \mathcal{J}_K \rho_c}$. Cuando $\mathcal{J}_{RKKY} \gg k_B T_K$, se forma un estado magnéticamente ordenado y cuando la situación es inversa, se genera un estado fundamental tipo Kondo concentrado, en el que cada impureza está apantallada por los electrones de conducción. Debido a la simetría de traslación, se formaría una banda coherente de cuasipartículas que involucra a todos los sitios y que, a diferencia del caso de la impureza, tendería a hacer disminuir la resistividad del metal a medida que disminuye la temperatura. Estos argumentos se resumen en un diagrama de fases conocido como el *diagrama de Doniach* (ver Fig. 1.2), y es uno de los primeros intentos de entender la física de los fermiones pesados.

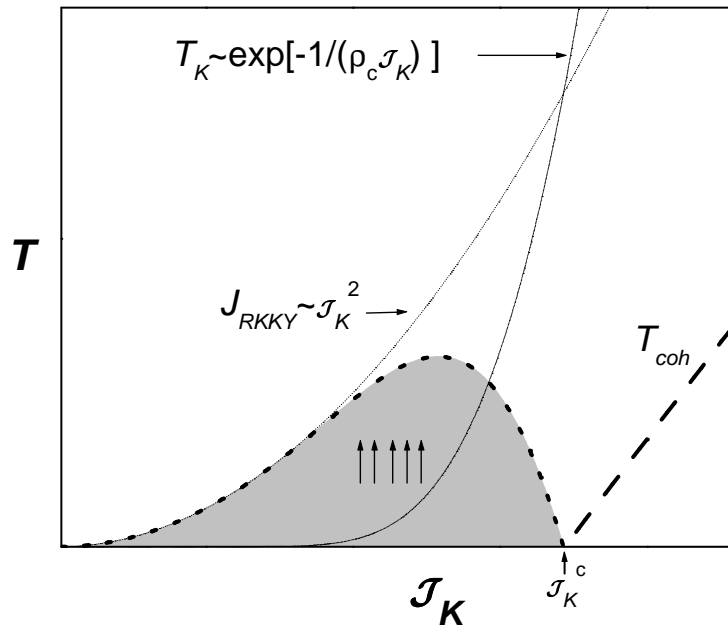


Figura 1.2: Esquema del diagrama de Doniach. La región sombreada representa la zona donde es estable la fase magnéticamente ordenada. Por encima de \mathcal{J}_K^c predomina un estado fundamental tipo líquido de Fermi.

Según esta idea, partiendo de la fase magnética, ésta se vuelve inestable a medida que $\mathcal{J}_K \rightarrow \mathcal{J}_K^c$. Esta zona de inestabilidad es actualmente muy estudiada tanto experimental como teóricamente dado que hay bastante consenso en que el punto \mathcal{J}_K^c es un *punto crítico cuántico*, en el que, a pesar de que las fluctuaciones térmicas están congeladas, se observa un comportamiento crítico debido a las fluctuaciones cuánticas entre los estados fundamentales que compiten. Esta competencia da origen a inusuales efectos, tales como comportamientos tipo no-líquido de Fermi en las propiedades de baja temperatura.

Sin embargo, serias objeciones se hicieron inmediatamente a este modelo, entre las que se mencionan la *paradoja del agotamiento* (“*exhaustion paradox*”), que mediante simples

argumentos postula que en una aleación concentrada de momentos magnéticos no habría suficientes electrones de conducción para apantallar a todos los momentos. Cualitativamente, pensando en la imagen de la nube de apantallamiento de Kondo, los electrones de conducción que intervienen en el apantallamiento son aquellos con energía del orden $k_B T_K$ alrededor de E_F . Esto implica que la nube de Kondo tiene una extensión aproximada de $\xi_K \sim v_F/k_B T_K$, donde v_F es la velocidad de Fermi. Esto sugiere que si la concentración de impurezas es mayor que $\sim 1/\xi_K^3$, no hay suficientes electrones de conducción para apantallar a todos los momentos magnéticos. Por otro lado, la imagen tradicional de la “nube de Kondo” ha sido refutada por P. Coleman [44], argumentando que los electrones de conducción que intervienen en el proceso de apantallamiento no son sólo aquellos con energías $|\epsilon| < |E_F \pm k_B T_K|$, sino *todos* los electrones de la banda. De esta manera, no existiría tal paradoja. Este es un tema todavía controversial.

Otra objeción importante al modelo de Doniach se relaciona con el valor crítico \mathcal{J}_K^c para el cual comienza a ser favorable formar un estado concentrado de Kondo. Según el cálculo de Doniach, el valor de \mathcal{J}_K^c es comparable al ancho de banda D , lo que es varias veces mayor a las estimaciones que surgen de los experimentos, con lo que la mayoría de los compuestos serían magnéticamente ordenados a baja temperatura.

Una posible salida a esta segunda objeción estaría relacionada con la alta degeneración del momento angular en los sistemas de tierras raras y actínidos, que permite disminuir el valor de \mathcal{J}_K^c , favoreciendo la formación del estado de Kondo fundamental. Hoy en día está más o menos aceptado que el estado fundamental de un fermión pesado por encima de \mathcal{J}_K^c es un líquido de Fermi coherente.

1.2 El efecto Kondo en sistemas nanoscópicos

Los recientes avances en nanotecnología han permitido manipular y controlar la materia a escala atómica [45]. Una de las herramientas más importantes para ello es el *microscopio de efecto túnel*, más conocido como STM por sus siglas en inglés (“*scanning tunnelling microscope*”). Este microscopio es capaz de tomar imágenes de una superficie con resolución atómica, mover átomos individuales a través de la superficie y medir el espectro de energía en sitios precisos de la misma.

Recientemente, el STM ha sido usado para tomar imágenes y manipular impurezas magnéticas en la superficie de metales [5, 6, 7] posibilitando estudiar el problema de Kondo desde una nueva perspectiva. En 2002, H. Manoharan *et al.* [46], en IBM-Almaden, Estados Unidos, usando un STM construyeron una elipse de átomos alrededor de una impureza de cobalto, que se colocó en uno de los focos de la elipse (ver Fig. 1.3 (a)). Luego, usaron un STM para medir el espectro de energías de la impureza de cobalto y encontraron una resonancia muy marcada, que correspondía a la resonancia de Kondo. Posteriormente, realizaron la misma medición en el foco *vacío* y, sorprendentemente, también ahí encontraron una resonancia de Kondo. Por su carácter (análogo a un espejismo) se llamó a este efecto *espejismo cuántico*. Las primeras interpretaciones del fenómeno sugerían que, debido a la geometría de la elipse, las funciones de onda electrónicas que pasan por un foco debían necesariamente pasar por el otro, generando así una imagen del fenómeno. Sin embargo, trabajos

posteriores [47, 48, 49, 50, 51, 52], demostraron que esta idea semiclásica no era del todo correcta. Cuánticamente, los estados electrónicos dentro de la elipse se discretizan debido al confinamiento que introducen los átomos del borde. En el experimento de Manoharan *et al.*, el corral está construido de tal forma que el nivel de Fermi de la superficie coincide con el nivel del estado número 42 (en orden creciente de energía) de la elipse. Cuando la temperatura baja por debajo de T_K , los estados de conducción apantallan el momento magnético de la impureza, lo que se observa en el espectro STM como una antiresonancia de Fano muy angosta cerca de la energía de Fermi. La separación típica de niveles que se acoplan apreciablemente con la impureza es $\Delta > T_K$ por lo que, esencialmente sólo el estado 42 participa de este apantallamiento. En un mapa bidimensional de la conductancia diferencial (espectro de energías) en el nivel de Fermi, puede verse claramente la densidad del estado 42, en una asombrosa y bella combinación de los efectos de confinamiento cuántico y del efecto Kondo. Este estado tiene máximos de amplitud en los focos, lo que permite explicar el efecto del “espejismo cuántico” (ver Fig. 1.3 (a)).

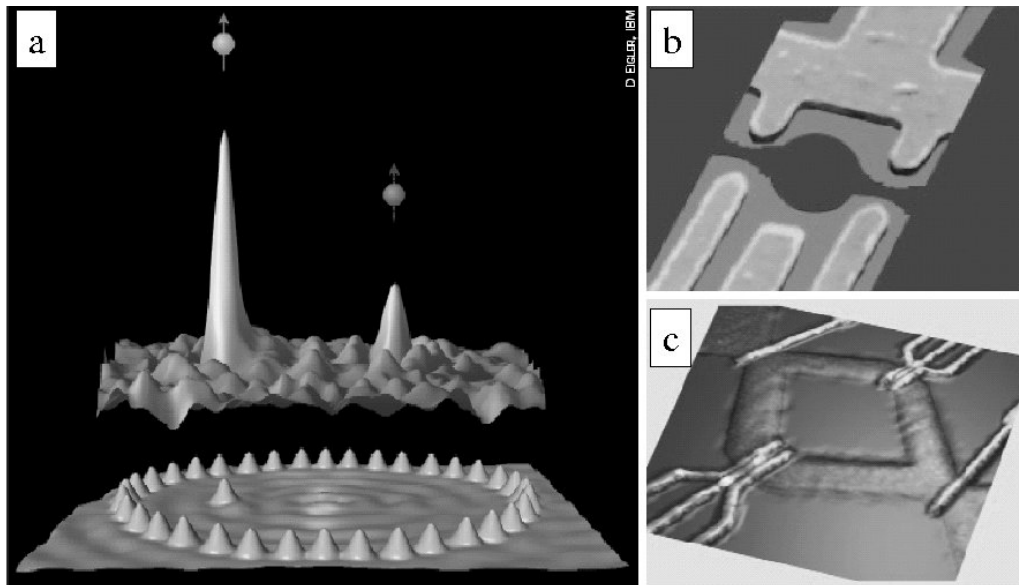


Figura 1.3: (a) Esquema del sistema estudiado por Manoharan *et. al* [46], que consta de un corral cuántico con una impureza magnética en uno de sus focos. (b) Esquema de un punto cuántico semiconductor. La región central es el área efectiva del punto cuántico. Se muestran también los contactos donde se aplican los distintos potenciales. (c) Esquema de dos puntos cuánticos colocados en un anillo semiconductor [45].

Otro ejemplo en el que se han visto claros indicios de la física de Kondo, es en recientes experimentos de transporte electrónico a través de las estructuras llamadas *puntos cuánticos* (o “*quantum dots*” en inglés). Los puntos cuánticos semiconductores son pequeñas porciones de semiconductor que pueden albergar un número reducido de electrones. Aprovechando el desarrollo tecnológico en la fabricación de circuitos a pequeña escala, los puntos cuánticos se construyen diseñando circuitos electrónicos que permiten aislar, mediante la aplicación de potenciales eléctricos, los electrones en una región de un gas de electrones bidimensional provenientes de un *pozo cuántico* o de una *heterojuntura semiconductor*. Además, también

mediante la aplicación de potenciales, es posible cambiar el número de electrones en la región del punto cuántico.

Debido al confinamiento inducido por los potenciales, los puntos cuánticos se comportan en varios aspectos como átomos artificiales, pero tienen la ventaja de ser muy versátiles en cuanto a la posibilidad de variar los parámetros que lo caracterizan (posición de los niveles de energía, grado de acoplamiento, etc), a diferencia de los átomos reales. Si un número impar n de electrones se encuentra confinado en el punto cuántico, su spin será necesariamente distinto de cero y semi-entero. En forma efectiva, el punto cuántico puede comportarse como una impureza magnética. El mar de electrones de conducción está conformado por los electrones del gas bidimensional que quedan afuera del punto cuántico. Desde el punto de vista de su descripción teórica, éste puede modelarse aproximadamente con el hamiltoniano de Anderson, donde el parámetro ϵ_d puede variarse mediante un *potencial de compuerta* V_g , la hibridización V mediante los potenciales de confinamiento y U está representado por la energía de carga capacitiva del punto cuántico $E_C = e^2/C$, donde C es la capacitancia del punto cuántico. Gracias a esta energía de carga, es posible mantener un número estable de electrones para pequeñas variaciones de V_g , lo que produce el llamado *bloqueo de Coulomb*: la corriente a través del punto cuántico está fuertemente suprimida debido a que agregar o quitar un electrón del punto cuántico cuesta una energía E_C .

Diseñando circuitos apropiados, puede “obligarse” a los electrones a circular por el punto cuántico, y midiendo la corriente que circula puede obtenerse información sobre éste.

Diversos experimentos [2, 3] han demostrado que el efecto Kondo produce un incremento de la conductancia a través del punto cuántico cuando $T < T_K$, en las regiones en que V_g induce un número de electrones n impar. A pesar de que en las regiones en que n es par, la conductancia disminuye al disminuir T debido a que desaparecen las fluctuaciones térmicas [53], en las regiones con n impar, la conductancia *augmenta*. Esto se debe a la formación de la resonancia de Kondo, centrada en E_F , en el sitio del punto cuántico. La existencia de un estado ligado virtual, al contrario de los experimentos de los años '30 en impurezas en metales, disminuye la resistencia, ya que la conductancia resulta proporcional a la densidad de estados en el punto cuántico [2, 3].

1.3 Organización de esta tesis

La presente tesis se organiza de la siguiente manera. En el capítulo 2 se expone un formalismo conocido como *desarrollo en $1/N$* , a partir del cual se obtienen diversas aproximaciones al cálculo de propiedades termodinámicas y dinámicas del problema de la impureza. También se exponen algunos resultados teóricos y comparaciones con experimentos termodinámicos en los recientemente sintetizados compuestos de valencia intermedia $\text{Yb}_2\text{M}_3\text{Ga}_9$, con $\text{M}=\text{Rh, Ir}$, y con el compuesto $\text{Yb}_3\text{Ni}_5\text{Al}_{19}$. En el capítulo 3 se describe el *método de bosones esclavos*, y se muestran resultados sobre la aplicación del método de al cálculo de la densidad local de estados en corrales cuánticos. Finalmente, en los capítulos 4 y 5 se presenta un estudio del transporte a $T = 0$ a través de arreglos de puntos cuánticos interactuantes, para diferentes configuraciones, haciendo énfasis en el transporte en el régimen de Kondo.

Capítulo 2

Propiedades físicas de compuestos de valencia intermedia

2.1 Introducción

El término *valencia intermedia* apareció por primera vez en referencia a compuestos como el $(\text{La}_{1-x}\text{Ca}_x)\text{Mn}_{1-x}^{+3}\text{Mn}_x^{+4}\text{O}_3$, investigado por Jonker y van Santen en 1950 [54], y como el Fe_3O_4 . En estos compuestos, las especies Mn^{+3} y Mn^{+4} , y Fe^{+2} y Fe^{+3} están físicamente separadas, ocupando sitios distintos de la red periódica [55].

Los primeros estudios que revelaron deslocalización en los electrones $4f$ fueron experimentos de presión en SmS . A presión atmosférica, el SmS es un semiconductor donde los iones Sm^{+2} se encuentran en el multiplete $^6\text{F}_0$. A una presión de 6.5 kbar, sufre una transición de primer orden a una fase metálica. Esto se explica teniendo en cuenta que los niveles $4f^6$ del Sm^{+2} se encuentran justo por debajo de la banda de conducción vacía $5p6s$. Con la aplicación de presión, las bandas se ensanchan debido a un incremento del solapamiento de las funciones de onda, y el borde inferior de la banda de conducción $5p6s$ cruza el nivel de los estados $4f^6$ del Sm^{+2} , lo que origina que algunos electrones $4f$ ocupen la banda de conducción. Mediciones del corrimiento Mössbauer sugieren que a esa presión, el Sm se encuentra en una valencia *intermedia* entre +2 y +3, y que dicha valencia es la misma en todos los sitios, a diferencia de los compuestos $(\text{La}_{1-x}\text{Ca}_x)\text{Mn}_{1-x}^{+3}\text{Mn}_x^{+4}\text{O}_3$ y Fe_3O_4 , mencionados anteriormente.

Posteriormente, este estado de valencia mixta o intermedia pudo ser identificado también en otros compuestos, en condiciones normales de presión y temperatura, como en el SmB_6 , CePd_3 , CeSn_3 , YbInAu , EuCu_2Si_2 , etc. [56]. Las características principales de estos compuestos son el comportamiento paramagnético (susceptibilidad de Pauli), que se mantiene hasta muy baja temperatura, en contraste con muchas de las tierras raras, que presentan orden magnético, y comportamiento lineal del calor específico a baja temperatura, con altos valores de $\chi(0)$ y de $\gamma = C(T)/T|_{T=0}$, cientos de veces mayores que en un metal tradicional. Estos resultados, y diversos experimentos de Haas-van Alphen sugieren fuertemente que el estado fundamental de estos compuestos es un líquido de Fermi.

Como se mencionó en la Introducción (Cap. 1), a partir de la conjetura de S. Doniach,

se comenzó a analizar a estos compuestos como una versión concentrada de la impureza de Kondo. Cualitativamente, los compuestos de valencia intermedia están lejos de la inestabilidad magnética dada por el punto \mathcal{J}_K^c en el diagrama de Doniach, bien adentro en el régimen paramagnético de líquido de Fermi.

Para intentar explicar los datos experimentales, se han sugerido distintos modelos teóricos. El modelo de impureza de Anderson posee un régimen de valencia intermedia cuando $|\epsilon_f - E_F| \simeq \Gamma$. Uno espera un comportamiento cualitativamente similar para el modelo de Anderson periódico sustituyendo Γ por el ancho efectivo de la banda de electrones f . Esto, sumado al hecho de que ambos modelos tienen un estado fundamental (en algún régimen de parámetros) que corresponde a un líquido de Fermi, podría explicar el relativo éxito que ha tenido el modelo de impureza de Anderson para explicar datos experimentales de la termodinámica, a pesar de que la naturaleza de ambos líquidos de Fermi son cualitativamente diferentes. Las diferencias se ponen en evidencia en, por ejemplo, las mediciones de transporte, que muestran un comportamiento coherente de la resistividad a baja temperatura, que va como $\sim T^2$, mientras que en una impureza de Kondo la dispersión magnética genera un mínimo en la resistividad.

Esta parte de la tesis es el resultado de una colaboración con físicos experimentales del Laboratorio Nacional de Los Alamos (EUA), iniciada para caracterizar compuestos de Yb (yterbio) recientemente sintetizados. El trabajo se centró en el estudio de las propiedades termodinámicas y dinámicas de los compuestos $\text{Yb}_2\text{Rh}_3\text{Ga}_9$, $\text{Yb}_2\text{Ir}_3\text{Ga}_9$ y $\text{Yb}_3\text{Ni}_5\text{Al}_{19}$, dentro del marco del modelo de impureza de Anderson. Esto se encuadra dentro de los intentos que se realizan actualmente por alcanzar un mayor entendimiento en la fenomenología de los compuestos de valencia intermedia y de los fermiones pesados en general basados en tierras raras.

El presente capítulo se organiza de la siguiente manera: en las Secs. 2.2, 2.3 y 2.4 se discute el marco teórico general y las aproximaciones utilizadas. En la Sec. 2.5 se muestran los resultados del modelo y las comparaciones con los datos experimentales y finalmente, en la Sec. 2.6 se expone un breve resumen y las conclusiones de este capítulo.

2.2 El método del desarrollo en $1/N$

Anderson en 1981 propuso utilizar la degeneración debida al momento angular $N = 2J + 1$ en los estados fundamentales de las tierras raras, para definir un parámetro $1/N$ con respecto al cual realizar desarrollos perturbativos sistemáticos [57]. Este tipo de desarrollos se emplean a menudo en física estadística y teoría de campos. La utilidad de esto reside en el hecho que aproximaciones de bajo orden en $1/N$ contienen los ingredientes básicos para describir la física del efecto Kondo de la impureza. La idea básica detrás de esta aproximación es que al tomar el límite $N \rightarrow \infty$, cada término del hamiltoniano crece extensivamente con N . En este límite, las fluctuaciones cuánticas en las propiedades intensivas (por ej.: la densidad electrónica) se vuelven cada vez más pequeñas, escaleando como $1/N$.

Por otro lado, organizando las expansiones en términos de este parámetro puede verse que los términos de interacción entre sitios son $\mathcal{O}(1/N)$ respecto de la interacción local. De esta manera, puede proponerse un tratamiento sistemático de la red de Kondo en términos

de este parámetro y partiendo de la física local.

Otra justificación para utilizar resultados de impureza en la interpretación de los compuestos concentrados, es la notable similitud en las propiedades de baja temperatura. De alguna manera, esto indicaría que los efectos de coherencia en los electrones f no son demasiado importantes, y que predominan los efectos locales. De todas formas, *en el caso de tratarse de un compuesto no magnético*, la invariancia traslacional impone la restricción de que el estado fundamental sea un líquido de Fermi [58]. La solución de compromiso para explicar el comportamiento local anteriormente señalado, es que por encima de cierta temperatura que llamaremos $T_{coh} \ll T_K$, el sistema experimenta un *crossover* desde un líquido de Fermi coherente hacia un arreglo más o menos independiente de impurezas apantalladas. Esta imagen se aplica con mucho éxito en la descripción de los llamados compuestos de *valencia intermedia*, que estudiaremos en esta tesis. Más allá de estos argumentos cualitativos para justificar el tratamiento de la red como una colección de impurezas debe reconocerse que, en rigor, la física de los sistemas concentrados es aún un problema abierto y existen muchos aspectos por resolver.

Comenzamos con una conveniente generalización del hamiltoniano de Anderson para el caso degenerado

$$H_A = H_{band} + H_f + H_{mix}, \quad (2.1)$$

$$H_{band} = \sum_{k,m} \epsilon_k n_{k,m}, \quad (2.2)$$

$$H_f = \epsilon_{f,m} \sum_m n_m + U \sum_{m>m'} n_m n_{m'}, \quad (2.3)$$

$$H_{mix} = V \sum_{k,m} c_{k,m}^\dagger f_m + \text{H.c.} \quad (2.4)$$

Los operadores de creación de electrones en la impureza y en la banda son, respectivamente, f_m^\dagger y $c_{k,m}^\dagger$, donde m es la proyección del momento angular en la dirección z , o de manera más general, un número cuántico que describe los estados que pertenecen a las distintas representaciones irreducibles dadas por la simetría del campo cristalino. Se supone resuelto el problema de la impureza desacoplada de la banda de conducción, en la configuración f^1 , con autoestados $f_m^\dagger|0\rangle \equiv |f^1, m\rangle$.¹

El índice continuo k es el módulo del vector \vec{k} . Los parámetros U y V son respectivamente la repulsión coulombiana en el sitio de la impureza y la hibridización con los electrones de la banda. En este hamiltoniano se ha hecho la suposición de que las energías ϵ_k son independientes del número cuántico m . Este modelo es una extensión razonable del hamiltoniano de impureza de Anderson con spin $1/2$ para sistemas con degeneración orbital con interacciones spin-órbita fuertes. Por ello, la hibridización entre electrones de la impureza y de la banda ocurre dentro de un determinado subespacio con j definido, donde el autovalor de \vec{J}^2 es $j(j+1)$.

¹Para simplificar la discusión presentamos el problema de en términos de electrones. Esto es directamente aplicable al caso del Ce. Para el caso del Yb, los resultados son idénticos mediante una transformación electrón-hueco.

Dado que la energía de Coulomb U en estos compuestos es típicamente del orden de 6-7 eV, y la hibridización efectiva $\Gamma = \pi\rho_c V^2$, donde $\rho_c \equiv \rho_c(E_F)$ (la densidad de estados de conducción por spin en el nivel de Fermi) [56], es del orden de 0.1 eV, es natural intentar atacar el problema tratando las correlaciones exactamente y el término de hibridización en forma perturbativa. Para mediciones de las propiedades del sistema realizadas a temperaturas y/o energías bajas, el valor exacto de U no es importante. El análisis del hamiltoniano H_A se simplifica en el límite $U \rightarrow \infty$, ya que esta suposición elimina del espacio de Hilbert los estados con ocupación mayor a 1 en la impureza. Entonces, se intenta resolver un problema más simple, donde el hamiltoniano nuevo es H_A sujeto a la condición

$$\sum_m \langle f_m^\dagger f_m \rangle \leq 1. \quad (2.5)$$

El problema que trae esta condición es que los operadores f_m^\dagger y f_m ya no obedecen reglas de anticonmutación simples (por ejemplo, $f_{m'}^\dagger |f^1; m\rangle$ (con $m' \neq m$) da cero (ya que la doble ocupación está prohibida) en vez de $|f^2; m, m'\rangle$). Esto imposibilita la aplicación de los métodos perturbativos diagramáticos de muchos cuerpos usuales, donde se hace extensivo uso del teorema de Wick. Una posibilidad para solucionar este problema es incorporar partículas auxiliares, típicamente bosones, con la idea de reformular la manera en que se trata matemáticamente el vínculo de la Ec. (2.5). Con esta reformulación del problema, los estados posibles del sistema se representan como:

$$\begin{aligned} |f^0\rangle &\rightarrow e^\dagger |0\rangle, \\ |f^1; m\rangle &\rightarrow \tilde{f}_m^\dagger |0\rangle, \end{aligned} \quad (2.6)$$

donde el operador e^\dagger crea un bosón y \tilde{f}_m^\dagger crea un fermión con proyección m . En realidad, usualmente se dice que éstas son *pseudo-partículas* ya que deben obedecer el vínculo de la Ec. (2.5), que se expresa como:

$$\sum_m \tilde{f}_m^\dagger \tilde{f}_m + e^\dagger e = 1. \quad (2.7)$$

Con esta representación, los operadores fermiónicos originales del hamiltoniano H_A se expresan como

$$\begin{aligned} f_m &\rightarrow e^\dagger \tilde{f}_m, \\ f_m^\dagger &\rightarrow \tilde{f}_m^\dagger e. \end{aligned} \quad (2.8)$$

La ventaja de este método radica en el hecho fundamental de que el hamiltoniano H_A conserva el número total de pseudo-partículas. Podemos poner esto más explícitamente de la siguiente manera:

$$\sum_m \tilde{f}_m^\dagger \tilde{f}_m + e^\dagger e = Q = 1, \quad (2.9)$$

donde Q es el operador de número total de pseudo-partículas, que verifica $[H_A, Q] = 0$. Cabe señalar que esta representación es formalmente exacta y reproduce las mismas propiedades

que el modelo original. La ventaja es que permite trabajar en una primera etapa como si no existiera el vínculo, con lo cual se pueden utilizar las técnicas diagramáticas usuales (se tienen operadores con relaciones de conmutación adecuadas) pero se obtiene una serie de estados sin sentido físico (todos aquellos donde $Q \neq 1$). Para eliminar éstos, en una etapa posterior se debe proyectar sobre el subespacio con $Q = 1$.

Existen diversas formas de imponer el vínculo de la Ec. (2.9) y cada una genera un esquema de aproximación diferente. Uno de ellos, el método de bosones esclavos, incorpora el vínculo de la Ec. (2.9) mediante un multiplicador de Lagrange en el hamiltoniano H_A y posteriormente se realiza una aproximación de *punto de ensilladura* (“*saddle-point approximation*”) utilizando integrales funcionales para integrar exactamente los grados de libertad fermiónicos [33, 34, 35, 36]. Este método será explicado en detalle en el Capítulo 3 de esta tesis.

Otra forma de imponer el vínculo es utilizar proyectores sobre los subespacios físicos del problema [1, 59]. El vínculo en este caso es

$$\sum_m |m\rangle\langle m| + |0\rangle\langle 0| = 1, \quad (2.10)$$

y el hamiltoniano H_A queda expresado como

$$H_A = H_{band} + H_f + H_{mix}, \quad (2.11)$$

$$H_{band} = \sum_{k,m} \epsilon_k n_{k,m}, \quad (2.12)$$

$$H_f = \sum_m \epsilon_{f,m} |m\rangle\langle m|, \quad (2.13)$$

$$H_{mix} = \sum_{k,m} V_{k,m} \left(c_{k,m}^\dagger |0\rangle\langle m| + \text{H.c.} \right), \quad (2.14)$$

donde se adoptó la notación $|m\rangle \equiv |f^1; m\rangle$ y $|0\rangle \equiv |f^0\rangle$.

Vamos a concentrarnos en calcular la función de partición del problema [56]

$$\begin{aligned} Z &= \text{Tr}_f \text{Tr}_{band} \{ e^{-\beta H_A} \}, \\ &= \frac{1}{2\pi i} \int_C e^{-\beta z} \text{Tr}_f \text{Tr}_{band} \left\{ \frac{1}{z - H_A} \right\} dz, \end{aligned} \quad (2.15)$$

donde el contorno en el plano complejo C abarca todas las singularidades del operador resolvente $(z - H_A)^{-1}$, y donde el símbolo Tr_i denota la traza sobre todos los estados de la banda ($i = band$) o de la impureza ($i = f$). Para desarrollar una teoría perturbativa en el término H_{mix} , conviene definir

$$Z_f \equiv Z/Z_{band}, \quad (2.16)$$

donde Z_{band} es la función de partición de la banda de conducción no interactuante. Luego, expresando $\text{Tr}_{band}\{\dots\} = \sum_{N^{band}} \langle N^{band} | \dots | N^{band} \rangle$ y redefiniendo $z \rightarrow z + E_N^{band}$ en cada término de la traza sobre los estados de la banda, tenemos

$$Z_f = \frac{1}{2\pi i} \int_C e^{-\beta z} \text{Tr}_f \sum_{N^{band}} \frac{e^{-\beta E_N^{band}}}{Z_{band}} \left\langle N^{band} \left| \frac{1}{z - H_A} \right| N^{band} \right\rangle dz. \quad (2.17)$$

A continuación, usamos la identidad [56]

$$\frac{1}{z-H} = \frac{1}{z-H_0} \sum_{n=0}^{\infty} \left[H_I \frac{1}{z-H_0} \right]^n, \quad (2.18)$$

donde H puede escribirse como $H = H_0 + H_I$. En nuestro caso, $H_0 = H_f + H_{band}$ y $H_I = H_{mix}$. La identidad en la Ec. (2.18) recuerda a la ecuación de Dyson. Se puede intentar establecer una serie perturbativa por la forma particularmente simple que tiene la interacción en el término H_{mix} . Puede verse que el valor medio entre los estados de banda en la Ec. (2.17) puede escribirse como

$$\sum_{N^{band}} \frac{e^{-\beta E_N^{band}}}{Z_{band}} \left\langle N^{band} \left| \frac{1}{z-H_A} \right| N^{band} \right\rangle = G_0(z) |0\rangle \langle 0| + \sum_m G_m(z) |m\rangle \langle m|, \quad (2.19)$$

donde $G_0(z)$ y $G_m(z)$ son funciones en el plano complejo. Para ver esto más claramente, se introduce la notación gráfica de la Fig. 2.1, donde $G_{k,m}^{(0)}$ es el propagador de un electrón de la

$$\begin{aligned} G_{k,m}^{(0)} &= \xrightarrow{k,m} \text{—————} \\ G_0^{(0)} &= \text{~~~~~} \xrightarrow{\quad} \text{~~~~~} \\ G_m^{(0)} &= \text{-----} \xrightarrow{m} \text{-----} \end{aligned}$$

Figura 2.1: Representación diagramática de los propagadores libres.

banda de conducción con impulso k y proyección m , $G_0^{(0)}$ es el propagador libre del estado vacío y finalmente $G_m^{(0)}$ es el propagador libre de un orbital f ocupado con un electrón de proyección m . En esta notación, el vértice de la interacción se esquematiza en la Fig. 2.2 El

$$\text{-----} \xrightarrow{m} \text{~~~~~} \xrightarrow{k,m}$$

Figura 2.2: Vértice de la interacción H_{mix} .

diagrama de la Fig. 2.2 representa un electrón que inicialmente se encuentra en el estado $|m\rangle$ y salta al estado $|k, m\rangle$ de la banda de conducción, dejando a la impureza en el estado vacío $|0\rangle$. Los posibles diagramas que se pueden formar conservan el número cuántico m , como puede verse en los siguientes diagramas de la Fig. 2.3. Esto es así debido a que los valores medios $\langle N^{band} | H_{mix}^n | N^{band} \rangle$ dan contribuciones no nulas sólo para transiciones que conservan

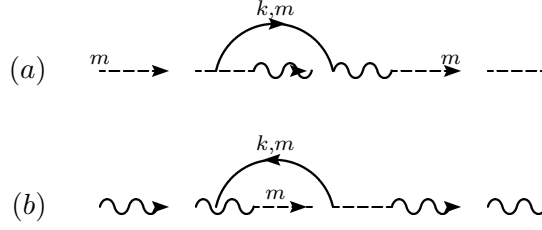


Figura 2.3: Representación diagramática de los términos de segundo orden en la interacción H_{mix} .

el número m . Volviendo a la Ec. (2.19), escribimos [1, 59]

$$G_0 = \frac{1}{z - \Sigma_0(z)}, \quad (2.20)$$

$$G_m = \frac{1}{z - \epsilon_{fm} - \Sigma_m(z)}, \quad (2.21)$$

donde las funciones Σ_0 y Σ_m pueden ser interpretadas como “autoenergías” para los estados vacío y ocupado respectivamente, y de ahora en más nos referiremos a G_0 y G_m simplemente como los propagadores del estado vacío y ocupado. La introducción de estos propagadores es útil dado que tienen representaciones diagramáticas sencillas. En términos de estas funciones que acabamos de definir, podemos expresar la función de partición como [1, 59]

$$Z_f = \int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{-\beta\omega} \left(\rho_0(\omega) + \sum_m \rho_m(\omega) \right) \quad (2.22)$$

donde

$$\rho_0(\omega) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} G_0(\omega), \quad (2.23)$$

$$\rho_m(\omega) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} G_m(\omega), \quad (2.24)$$

pueden ser interpretadas como las “densidades espectrales” para los estados vacío y ocupado. Sin embargo, es importante aclarar que estas cantidades *no son* las densidades espectrales de funciones de correlación dinámicas, y por lo tanto, no tienen sentido físico. Más allá de esto, sin embargo, permiten establecer una imagen de las propiedades termodinámicas del modelo de Anderson basada en configuraciones efectivas del orbital f , donde los grados de libertad de los electrones de conducción han sido promediados. Este método admite la aplicación de reglas de Feynman para evaluar diagramas perturbativos. Por ejemplo, para el diagrama de segundo orden de la Fig. 2.3(b), la autoenergía a $T = 0$ se calcula como [56, 1, 59]

$$\begin{aligned} \Sigma_0^{(2)}(z) &= \sum_{k,m} V_m^2 \frac{n_F(\epsilon_k)}{z + \epsilon_k - \epsilon_{f,m}}, \\ &= \sum_m V_m^2 \rho_c \ln \left(\frac{\epsilon_{f,m} - z}{D} \right), \end{aligned} \quad (2.25)$$

donde se ha supuesto una banda de conducción “chata”, con densidad de estados ρ_c y semiancho D , y donde $n_F(\omega)$ es la función de Fermi. Dadas las escalas típicas de energía del problema, la teoría más simple y obvia es tratar a la hibridización V_m como el parámetro pequeño de una expansión perturbativa. Para lograr descripciones razonables de las propiedades termodinámicas es necesario sin embargo hacer sumas de orden infinito en este parámetro [1, 59]. En lugar de hacer un desarrollo perturbativo en V_m , es útil hacer un desarrollo en potencias de $1/N$, donde N es la degeneración del estado fundamental del orbital f . Nótese que en el propagador del estado vacío de la Fig. 2.3(b), pueden insertarse N *loops* diferentes, o sea, cada uno correspondiente a los distintos números cuánticos m . Esto simplemente refleja la degeneración del orbital f . Para el propagador del estado ocupado m (Fig. 2.3(a)), sin embargo, sólo un *loop* correspondiente al estado vacío puede ser insertado. Como ya dijimos, esto es así debido a que un electrón con momento angular m sólo puede saltar a la banda de conducción con la misma proyección. Para obtener un límite bien definido en el desarrollo en $1/N$, se debe considerar al producto NV_m^2 como $O(1)$ (orden 1) [1, 59, 56]. En consecuencia, el diagrama de la Fig. 2.3(a) es de orden $O(1/N)$, mientras que el diagrama de la Fig. 2.3(b) es $O(1)$. De esta manera, los distintos desarrollos de los propagadores pueden ser clasificados en distintos órdenes de $1/N$ de manera sistemática. Sin embargo, este desarrollo tampoco provee propiedades uniformes en frecuencia como veremos más adelante, y para subsanar el problema es necesario realizar sumas de orden infinito.

Para hacer explícito el orden en $1/N$ en la expansión diagramática, en lo sucesivo se supondrá el reescalo $V_m \rightarrow V_m/\sqrt{N}$ en el término H_{mix} de la Ec. (2.14).

2.3 La aproximación autoconsistente NCA (“*Non Crossing Approximation*”)

La suma de orden infinito más simple se basa en la siguiente aproximación para las autoenergías de los propagadores vacío y ocupados [1, 59, 60]

$$\Sigma_0(z) = \sum_{k,m} V_{k,m}^2 n_F(\epsilon_k) G_m(z + \epsilon_k), \quad (2.26)$$

$$\Sigma_m(z) = \sum_k V_{k,m}^2 (1 - n_F(\epsilon_k)) G_0(z - \epsilon_k). \quad (2.27)$$

Estas ecuaciones junto con las Ecs. (2.20) y (2.21) forman un sistema de ecuaciones integrales no lineales acopladas, que se resuelve autoconsistentemente. Una representación gráfica de la aproximación se muestra en la Fig. 2.4. Básicamente, la aproximación surge de reemplazar los propagadores libres o “desnudos” $G_0^{(0)} = \rightsquigarrow$ y $G_m^{(0)} = \rightsquigarrow$ en los *loops* internos de las figuras 2.3(a) y 2.3(b), por los propagadores “vestidos” de la Fig. 2.5. Esta aproximación en los propagadores G_0 y G_m se conoce como NCA (“*Non Crossing Approximation*”) y su nombre se debe a que en el cálculo sólo se consideran los diagramas cuyas líneas de electrones de conducción no se cruzan, es decir, se excluyen los diagramas $O(1/N)^2$ y de orden superior, como el que se muestra en la Fig. 2.6. En principio, éstos pueden tenerse en cuenta formalmente mediante correcciones de vértice, pero resulta una buena aproximación despreciarlos

$$\Sigma_0(z) = \frac{\text{Diagram: A dashed horizontal line with an arrow pointing right, labeled 'm' below it. A solid curved arrow above it points from the right end back to the left end, labeled 'k,m' above it. The dashed line continues to the right after the loop.}}{G_m(z)} \quad (2.28)$$

$$\Sigma_m(z) = \frac{\text{Diagram: A wavy horizontal line with an arrow pointing right, labeled 'm' below it. A solid curved arrow above it points from the right end back to the left end, labeled 'k,m' above it. The wavy line continues to the right after the loop.}}{G_0(z)} \quad (2.29)$$

Figura 2.4: Autoenergías en la aproximación NCA.

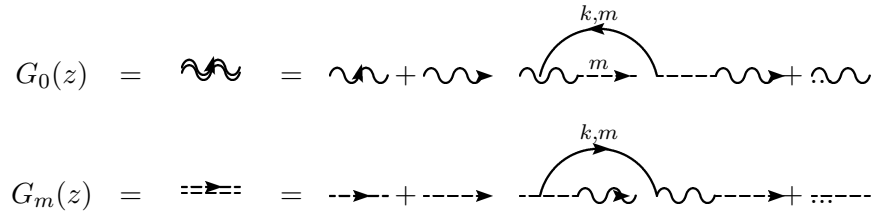


Figura 2.5: Propagadores vestidos.

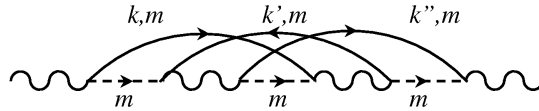


Figura 2.6: Diagrama con líneas de electrones de conducción que se cruzan (“crossing diagram”).

en un desarrollo para $N \rightarrow \infty$ [56, 1, 59]. La NCA permite calcular propiedades dinámicas y termodinámicas en función de la temperatura, con excelentes resultados, comparables con los obtenidos mediante Bethe-Ansatz [1, 59].

Las incógnitas que deben resolverse en el sistema de ecuaciones planteado en la NCA son las densidades $\rho_m(\omega, T)$ y $\rho_0(\omega, T)$. Una vez que el sistema de ecuaciones converge, a una cierta temperatura T , pueden hallarse las propiedades dinámicas y termodinámicas a partir de estas densidades, como se muestra brevemente a continuación.

2.3.1 Cálculo de propiedades físicas mediante la NCA

Densidad de estados f

La densidad de estados en la impureza, que llamaremos $\rho_{fm}(\omega)$, se calcula formalmente como

$$\rho_{fm}(\omega) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} G_{ff,m}(\omega + i0^+), \quad (2.30)$$

donde

$$G_{ff,m}(\omega + i0^+) = \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i(\omega+i0^+)t} \left[-i\Theta(t) \langle \{F_m(t), F_m^\dagger(0)\} \rangle \right], \quad (2.31)$$

es la transformada de Fourier de la función de Green retardada de la impureza. El operador $F_m \equiv |0\rangle\langle m|$ es el equivalente al operador de destrucción fermiónico f_m , en el subespacio reducido del problema. Es esta función de Green así definida la que tiene sentido físico, ya que por definición, indica la creación de un electrón f (creación del estado $|m\rangle$) y destrucción simultánea del vacío $|0\rangle$ a tiempo $t = 0$ y posterior remoción de la misma partícula a un tiempo posterior t . Los símbolos $\langle \dots \rangle$ deben ser entendidos como promedios sobre el ensamble gran canónico. Alternativamente, la función de Green retardada puede ser calculada mediante continuación analítica de la función de correlación de Matsubara

$$G_{ff,m}(i\omega_n) = \int_0^\beta d\tau e^{i\omega_n\tau} \left[-T_\tau \langle F_m(\tau) F_m^\dagger(0) \rangle \right] d\tau, \quad (2.32)$$

donde $i\omega_n = [2\pi i(n + 1/2)]/\beta$ es una frecuencia fermiónica de Matsubara [61, 62, 63]. Las reglas para computar $G_{ff,m}(i\omega_n)$ a un cierto orden perturbativo en V/\sqrt{N} se encuentran en la Ref. [1]. El diagrama que representa a $G_{ff,m}(i\omega_n)$ en ausencia de hibridización se indica en la Fig. 2.7. Puede observarse que el propagador $G_{ff,m}^{(0)}(i\omega_n)$ involucra ambas funciones $G_m^{(0)}$ y $G_0^{(0)}$, ya que el operador F_m^\dagger representa la creación de un electrón en el estado $|m\rangle$, mientras que F_m deja al sistema en el estado vacío $|0\rangle$. El procedimiento más simple para

$$G_{ff,m}^{(0)}(i\omega_n) = \text{Diagrama con vértices } F_m^\dagger \text{ y } F_m \text{ y propagadores } G_m^{(0)}(i\omega_n) \text{ y } G_0^{(0)}.$$

Figura 2.7: Representación diagramática de $G_{ff,m}$ en ausencia del término H_{mix} . Los vértices (representados con círculos) simbolizan a los operadores F_m^\dagger (F_m), por donde ingresa (sale) un electrón de proyección m y frecuencia $i\omega_n$.

incorporar los efectos del término H_{mix} , consistente con la aproximación NCA, es reemplazar los propagadores $G_0^{(0)}$ y $G_m^{(0)}$ por los propagadores “vestidos” de la Fig.2.5 [1, 59]. De esta manera, en la aproximación NCA, la función de Green de la impureza f se calcula como

$$G_{ff,m}(i\omega_n) = \frac{1}{Z_f} \int_C \frac{dz}{2\pi i} e^{-\beta z} G_0(z) G_m(z + i\omega_n), \quad (2.33)$$

donde el contorno C abarca todas las singularidades del integrando. Introduciendo la representación espectral [64]

$$G(z) = -\pi \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\rho(\epsilon)}{\epsilon - z}, \quad (2.34)$$

obtenemos

$$G_{ff,m}(i\omega_n) = \frac{1}{Z_f} \int_{-\infty}^{\infty} d\epsilon e^{-\beta\epsilon} [\rho_0(\epsilon) G_m(\epsilon + i\omega_n) - G_0(\epsilon - i\omega_n) \rho_m(\epsilon)], \quad (2.35)$$

2.3 La aproximación autoconsistente NCA (“Non Crossing Approximation”) 23

y finalmente, continuando analíticamente $i\omega_n \rightarrow \omega + i0^+$, obtenemos [1, 59]

$$\begin{aligned}\rho_{fm}(\omega) &= -\frac{1}{\pi} \text{Im} G_{ff,m}(\omega + i0^+), \\ \rho_{fm}(\omega) &= \frac{(1 + e^{-\beta\omega})}{Z_f} \int_{-\infty}^{\infty} d\epsilon e^{-\beta\epsilon} \rho_0(\epsilon) \rho_m(\omega + \epsilon).\end{aligned}\quad (2.36)$$

Esta expresión para la densidad de estados f es una convolución de las densidades espectrales ρ_0 y ρ_m . Esto es razonable, ya que ρ_{fm} mide el peso de las transiciones entre estas dos configuraciones. A temperaturas bajas, la densidad ρ_{fm} tiene dos características dominantes: una resonancia centrada cerca de ϵ_{fm} , y otra mucho más angosta, centrada a una energía positiva T_0 con respecto al nivel de Fermi. La escala de energía T_0 está estrechamente relacionada con T_K y la llamaremos *energía de estabilización del singlete* dado que es la energía ganada por el sistema por formar un singlete de muchos cuerpos.

Físicamente, la resonancia centrada en ϵ_{fm} aparece por los efectos de vida media introducidos por la hibridización entre el nivel f y los electrones de la banda de conducción (ver Introducción). Cuando un electrón f es removido, los electrones en la banda de conducción rápidamente llenan de nuevo el nivel localizado a un ritmo que se puede calcular con la regla de oro de Fermi $\tau_m^{-1} = 2\pi\rho_c NV_m^2/\hbar$. Este es esencialmente el ancho de la primera resonancia. Sin embargo, una interpretación similar no puede ser aplicada a la resonancia cerca del nivel de Fermi. Esta aparece como consecuencia de que existe una pequeña proporción del estado $|0\rangle$ en la función de onda fundamental del sistema [1]. Son las transiciones entre la pequeña componente de la configuración $|0\rangle$ y los estados $|m\rangle$ las que generan esta resonancia, que llamaremos *resonancia de Kondo*. Al aumentar la temperatura del sistema por encima de T_0 , el peso de otras transiciones se hace comparable al peso de esta resonancia, y la misma desaparece.

Valencia n_f

Una propiedad directamente relacionada con la densidad de estados es la ocupación del nivel f o sea, la valencia de la impureza. Ésta está dada por [1, 59]

$$\begin{aligned}n_f(T) &= \sum_m \langle F_m^\dagger F_m \rangle, \\ &= \sum_m G_{ff,m}(\tau = 0), \\ &= \sum_m \frac{1}{\beta} \sum_n e^{i\omega_n 0^+} G_{ff,m}(i\omega_n), \\ &= \sum_m \int_{-\infty}^{\infty} d\epsilon n_F(\epsilon) \rho_{fm}(\epsilon),\end{aligned}\quad (2.37)$$

donde para llegar a la última línea se realizó una suma de Matsubara (ver Sec. 3.2). Para el caso isotrópico se verifica

$$n_f(T) = N \int_{-\infty}^{\infty} d\epsilon n_F(\epsilon) \rho_{fm}(\epsilon), \quad (2.38)$$

donde por simetría $\rho_{fm}(\epsilon)$ es igual para cualquier m . Como se muestra en la Ec.(A.7) del Apéndice A.1

$$n_f(T) = \frac{1}{Z_f} \sum_m \int_{-\infty}^{\infty} d\epsilon e^{-\beta\epsilon} \rho_m(\epsilon). \quad (2.39)$$

Susceptibilidad magnética dinámica y estática

El cálculo de esta propiedad es de central importancia para tratar de describir experimentos en los que se miden grados de libertad magnéticos. Para su cálculo es conveniente definir la función de correlación

$$M_f(t) = -i\Theta(t)\langle [\hat{M}(t), \hat{M}(0)] \rangle, \quad (2.40)$$

donde $\hat{M} \equiv g\mu_B \sum_m m|m\rangle\langle m|$, es la representación de $g\mu_B J_z$ para el caso en que hay simetría de rotación ², g es el factor de Landé y μ_B es el magnetón de Bohr. Al igual que antes, se calcula la función de correlación de Matsubara

$$M_f(i\nu_n) = \int_0^\beta d\tau e^{i\nu_n\tau} [-\langle \hat{M}(\tau), \hat{M}(0) \rangle], \quad (2.41)$$

donde $i\nu_n = 2\pi i n/\beta$ es una frecuencia bosónica de Matsubara [61, 62, 63]. Continuando analíticamente a frecuencias reales, se obtiene la susceptibilidad dinámica

$$\chi(\omega) = \frac{1}{\pi} \text{Im} M_f(\omega + i0^+) \quad (2.42)$$

Las reglas para evaluar la función $M_f(i\nu_n)$ están en la Ref. [1]. Nuevamente, “vistiendo” los propagadores de manera de mantener la consistencia de la NCA, se obtiene

$$M_f(i\nu_n) \simeq \frac{\mu_j^2}{3} \frac{1}{Z_f} \sum_m \int_C dz e^{-\beta z} G_m(z + i\nu_n) G_m(z), \quad (2.43)$$

$$= \frac{\mu_j^2}{3} \frac{1}{Z_f} \sum_m \int_{-\infty}^{\infty} d\epsilon e^{-\beta\epsilon} \rho_m(\epsilon) [G_m(\epsilon + i\nu_n) + G_m(\epsilon - i\nu_n)], \quad (2.44)$$

donde se definió $\mu_j^2 \equiv (g\mu_B)^2 j(j+1)$. Usando la Ec. (2.42) se obtiene finalmente [1, 59]

$$\chi(\omega) = -\frac{\mu_j^2}{3\pi} \frac{1}{Z_f} \sum_m \int_{-\infty}^{\infty} d\epsilon e^{-\beta\epsilon} \rho_m(\epsilon) [\rho_m(\epsilon + \omega) - \rho_m(\epsilon - \omega)]. \quad (2.45)$$

Estas expresiones serán de utilidad más adelante para la comparación con resultados experimentales.

²En el caso más general en que no es posible despreciar los efectos del campo cristalino, el operador se escribe (en la base que diagonaliza el campo cristalino) como $\hat{M} = \sum_{m,m'} \mu_{m,m'} |m\rangle\langle m'|$, donde $\mu_{m,m'} = g\mu_B \langle m|J_z|m'\rangle$

2.4 Soluciones aproximadas de la NCA

2.4.1 Formalismo variacional

Como se ha visto en la sección anterior, el formalismo de la NCA requiere el cálculo autoconsistente de las densidades espectrales $\rho_0(\omega)$ y $\rho_m(\omega)$. Esto resulta un poco engorroso desde el punto de vista técnico de la implementación del método. Además, a pesar de dar muy buenos resultados a alta temperatura, produce resultados no analíticos en algunas propiedades dinámicas a bajas temperaturas, y no satisface relaciones exactas para un líquido de Fermi a $T = 0$ [1, 65, 66]. Con el objeto de evitar estos resultados no analíticos, vamos a exponer una aproximación a la NCA, que parte de un formalismo variacional, válido estrictamente a $T = 0$.

Como se mencionó en la Introducción (Capítulo 1) de esta tesis, el método variacional se postuló para el modelo de Kondo en 1966 por Yosida [20]. Varma y Yafet propusieron en 1976 [21] una función de onda tipo singlete para el modelo de Anderson con $S = 1/2$, que contiene los ingredientes básicos de la física de la Kondo y de valencia intermedia a $T = 0$. Posteriormente, Gunnarson y Schönhammer, en 1983 presentaron una extensión del tratamiento variacional para el hamiltoniano de Anderson degenerado, estableciendo una expansión en términos del parámetro $1/N$ [67]. Los resultados de este método son exactos en el límite $N \rightarrow \infty$ [67, 68], lo que es satisfactorio desde el punto de vista teórico, ya que tiene el mismo límite de validez que la NCA.

Como se mencionó en la Introducción, desde el punto de vista del Grupo de Renormalización, a medida que la temperatura alcanza el límite $T \rightarrow 0$, la constante de intercambio \tilde{J}_K aumenta indefinidamente, “fluyendo” hacia el punto fijo estable $\tilde{J}_K \rightarrow \infty$ a $T = 0$. En estas circunstancias, el estado fundamental del sistema es un singlete formado por el spin de la impureza y los electrones de conducción. Por esta razón, la descripción del estado fundamental del sistema mediante el método variacional es sólo factible si la función de onda tiene $S = 0$. La función que se propuso es [21, 67]

$$|\Psi_g\rangle = A|\tilde{0}\rangle + \sum_{k,m} b_{k,m}|k,m\rangle, \quad (2.46)$$

donde aquí $|\tilde{0}\rangle = |0\rangle \otimes |FS\rangle$, representa el orbital f vacío (o, mediante una transformación electrón-hueco, el orbital f completamente lleno) más el mar de Fermi $|FS\rangle$. El estado $|k,m\rangle = f_m^\dagger c_{k,m}|\tilde{0}\rangle$, representa un estado con un electrón (o un hueco) con proyección m en el orbital f y un hueco (electrón) con la misma simetría e impulso k en la banda de conducción. Los parámetros variacionales son los coeficiente A y $b_{k,m}$. Para hallarlos, debe resolverse la ecuación [67, 69]

$$H_A|\Psi_g\rangle = E_g|\Psi_g\rangle, \quad (2.47)$$

que surge de encontrar el mínimo variacional de la funcional $\delta E[\Psi_g] = 0$, donde

$$E_g[\Psi_g] = \frac{\langle \Psi_g | H_A | \Psi_g \rangle}{\langle \Psi_g | \Psi_g \rangle}. \quad (2.48)$$

Evaluando la Ec.(2.47) miembro a miembro se obtiene

$$H_A|\Psi_g\rangle = \left[AE_F + \sum_{k,m} \frac{V_{k,m}^*}{\sqrt{N}} b_{k,m} \right] |\tilde{0}\rangle + \left[\sum_{k,m} A \frac{V_{k,m}}{\sqrt{N}} + b_{k,m} (E_F - \epsilon_k + \epsilon_{f,m}) \right] |k, m\rangle \quad (2.49)$$

$$E_g|\Psi_g\rangle = E_g A|\tilde{0}\rangle + E_g \sum_{k,m} b_{k,m} |k, m\rangle, \quad (2.50)$$

donde en adelante se supondrá $E_F = 0$. De estas expresiones, igualando coeficientes, surge una ecuación para la energía del estado fundamental E_g (ver Apéndice A.3)

$$E_g = \sum_m \frac{\Gamma_m}{\pi} \ln \left| \frac{\epsilon_{f,m} - E_g}{D + \epsilon_{f,m} - E_g} \right|, \quad (2.51)$$

donde $\Gamma_m = \pi V_m^2 \rho_c$. Para mayor simplicidad en las ecuaciones y en la discusión posterior, se definen las cantidades $T_0 \equiv \epsilon_{f,1} - E_g$, la diferencia entre el nivel de impureza más bajo $\epsilon_{f,1} \equiv \min\{\epsilon_{f,m}\}$ y el estado fundamental del sistema; y las energías de excitación $\Delta_m \equiv \epsilon_{f,m} - \epsilon_{f,1}$. La cantidad T_0 es la energía de estabilización del singlete de muchos cuerpos respecto de la energía del mar de Fermi lleno y un electrón en el nivel $\epsilon_{f,1}$. Esta es una escala de energía directamente relacionada con la temperatura de Kondo aunque, como veremos más adelante, T_0 y T_K no son exactamente iguales. Reescribiendo la ecuación anterior en términos de estas nuevas variables, se tiene

$$T_0 = \epsilon_{f,1} - \sum_m \frac{\Gamma_m}{\pi} \ln \left| \frac{T_0 + \Delta_m}{D + T_0 + \Delta_m} \right|. \quad (2.52)$$

En general, esta ecuación tiene 3 soluciones, como puede verse esquemáticamente en la Fig. 2.8, para el caso en que no hay campo cristalino. El segundo término de la Ec. 2.52 corresponde en la figura a la curva con un máximo pronunciado cerca de $T_0 = 0$. La energía del estado fundamental es la más baja de las tres, y en particular, por las definiciones que hemos utilizado, el estado fundamental verifica $T_0 > 0$. En general, el nivel de la impureza está a una energía muy por debajo del nivel de Fermi, por lo que $\epsilon_{f,1} \ll 0$. Además, el logaritmo en el segundo miembro de la Ec. (2.52) es una cantidad negativa, ya que el término dominante en su argumento es el semiancho de la banda de conducción D .

Para entender más intuitivamente la fórmula de la Ec. (2.52), analizamos el límite de Kondo en el caso isotrópico (campo cristalino nulo) donde se tiene $\Gamma_m = \Gamma$ y $\Delta_m = 0$. Aproximando para $T_0 \ll D$, $|\epsilon_{f,1}|$ eventualmente se tiene

$$\epsilon_{f,1} \simeq \frac{N\Gamma}{\pi} \ln \left| \frac{T_0}{D} \right|. \quad (2.53)$$

Explicitando el signo de $\epsilon_{f,1} = -|\epsilon_{f,1}|$ y despejando T_0 en la expresión anterior, se obtiene la expresión [56, 67]

$$T_0 \simeq D \exp \left(-\frac{\pi |\epsilon_{f,1}|}{N\Gamma} \right), \quad (2.54)$$

que reproduce correctamente la dependencia exponencial de la temperatura de Kondo con los parámetros del problema.

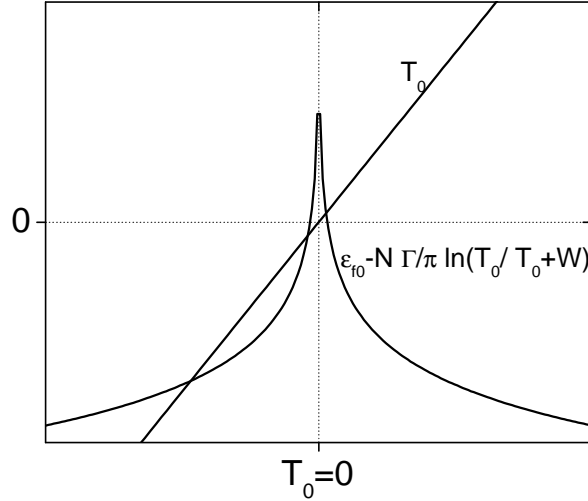


Figura 2.8: Representación esquemática de la ecuación 2.52. El campo cristalino es nulo en este caso para simplificar la discusión.

2.4.2 Cálculo de propiedades a $T = 0$

Valencia n_f^0

Una vez que se ha hallado el valor de T_0 que satisface la Ec. (2.52), y por consiguiente, se ha hallado la función de onda $|\Psi_g\rangle$ se pueden calcular diversas propiedades del sistema a $T = 0$, como por ejemplo, la ocupación del orbital f , $n_f(T = 0) \equiv n_f^0$. La ocupación del nivel ϵ_{fm} es (Ver Apéndice A.3) [66]

$$n_{fm}^0 = \frac{(1 - n_f^0)\Gamma_m}{\pi} \left(\frac{1}{T_0 + \Delta_m} - \frac{1}{D + T_0 + \Delta_m} \right). \quad (2.55)$$

donde

$$\begin{aligned} n_f^0 &= \sum_m n_{fm}^0, \\ &= 1 - \frac{1}{1 + \sum_m \frac{\Gamma_m}{\pi} \left(\frac{1}{T_0 + \Delta_m} - \frac{1}{D + T_0 + \Delta_m} \right)}. \end{aligned} \quad (2.56)$$

es la ocupación total del nivel f . Nuevamente, para entender un poco mejor la dependencia de la ocupación del orbital f , nos referimos al caso isotrópico y en el límite en que $D \gg T_0$. Bajo estas condiciones

$$n_f^0 = \frac{N\Gamma}{\pi T_0 + N\Gamma}, \quad (2.57)$$

y vemos que esta expresión verifica límites razonables, ya que para $T_0 \ll N\Gamma$, $n_f^0 \rightarrow 1$, lo cual es correcto ya que en el límite de Kondo, cuando el nivel f está muy por debajo de la

superficie de Fermi y los acoplamientos son muy pequeños, la ocupación de la impureza es prácticamente 1, obteniéndose un momento magnético localizado. Por el contrario, cuando $T_0 \sim NT$ (régimen de valencia intermedia), la ocupación del nivel f es menor debido a las fuertes fluctuaciones de la carga.

Susceptibilidad magnética

Otra cantidad que es de interés para la comparación con los experimentos y que será de utilidad más adelante es la susceptibilidad magnética estática a $T = 0$, que puede obtenerse a partir de la fórmula [9, 14]

$$\chi_0 = -\left. \frac{\partial^2 E_g}{\partial B^2} \right|_{B=0}. \quad (2.58)$$

Para poder utilizar esta fórmula, es necesario suponer que existe un pequeño campo magnético \vec{B} aplicado, acoplado al momento angular de la impureza, \vec{J} . Esto se logra incluyendo en el hamiltoniano H_A de la Ec. (2.11) el término

$$H_B = -g\mu_B \vec{J} \cdot \vec{B}. \quad (2.59)$$

Al aplicar un campo magnético pequeño, los niveles de la impureza se modifican. Un cálculo perturbativo a segundo orden en B permite calcular las energías corregidas como

$$\epsilon_{fm}(B) = \epsilon_{fm}^0 + g\mu_B B \langle m | J_\alpha | m \rangle + \sum_{m' \neq m} (g\mu_B B)^2 \frac{|\langle m | J_\alpha | m' \rangle|^2}{\Delta_m - \Delta_{m'}}, \quad (2.60)$$

donde las energías no perturbadas han sido indicadas como ϵ_{fm}^0 y donde α es la dirección en la que se aplica el campo \vec{B} . Utilizando la expresión de E_g en la Ec. (2.51) y derivando implícitamente, se obtiene para la susceptibilidad a $T = 0$ [66, 70]

$$\chi_0 = (g\mu_B)^2 \sum_m \left(n_{f,m} \frac{|\langle m | J_\alpha | m \rangle|^2}{\Delta_m + T_0} + 2 \sum_{m'} \frac{|\langle m | J_\alpha | m' \rangle|^2}{\Delta_m - \Delta_{m'}} \right), \quad (2.61)$$

donde se ha diagonalizado la perturbación de la Ec. (2.59) en los espacios degenerados y por ello la suma sobre m' excluye a estados con la misma energía. Esta expresión es la misma que se muestra en la Ref. [66], y en ella se ha despreciado la dependencia de los parámetros Γ_m con respecto al campo magnético.

A continuación mostramos una extensión al cálculo de Γ_m para incluir los efectos del campo magnético. Intuitivamente, se puede observar que dicha dependencia debe existir dado que los propios orbitales atómicos $|m\rangle$ se modifican con el campo B . Por tal razón, nuestra discusión parte de la fórmula de perturbaciones para los estados $|m\rangle$ (ver Ref. [71])

$$\begin{aligned} |\tilde{m}(B)\rangle &= |m\rangle - \sum_{m'} \frac{\langle m' | V_\alpha | m \rangle}{\Delta_{m'} - \Delta_m} |m'\rangle + \sum_{m', m''} \frac{\langle m' | V_\alpha | m'' \rangle \langle m'' | V_\alpha | m \rangle}{(\Delta_{m'} - \Delta_m)(\Delta_{m''} - \Delta_m)} |m'\rangle - \\ &- \sum_{m'} \frac{\langle m' | V_\alpha | m \rangle \langle m | V_\alpha | m' \rangle}{(\Delta_{m'} - \Delta_m)^2} |m'\rangle - \frac{1}{2} \sum_{m'} \frac{|\langle m' | V_\alpha | m \rangle|^2}{(\Delta_{m'} - \Delta_m)^2} |m\rangle, \end{aligned} \quad (2.62)$$

donde nuevamente la perturbación sobre subespacios degenerados ha sido diagonalizada. Este procedimiento permite encontrar una nueva base completa y ortogonal de estados $\{|\tilde{m}(B)\rangle\}$ que contienen los efectos del campo magnético. Suponemos que la banda de conducción no se modifica por el campo B y por lo tanto, los estados $c_{k,m}|FS\rangle$ (cuya energía ϵ_k es independiente de m) pueden ser reescritos en una nueva base, consistente con la simetría de los estados perturbados $|\tilde{m}(B)\rangle$. Esto se logra mediante el procedimiento de proyección

$$\begin{aligned} c_{k,\tilde{m}}^\dagger &= \frac{1}{\mathcal{N}} \left(\sum_{m'} \frac{V_{m'}}{\sqrt{N}} c_{k,m'}^\dagger \langle m'| \right) |\tilde{m}\rangle, \\ c_{k,\tilde{m}} &= \frac{1}{\mathcal{N}} \langle \tilde{m}| \left(\sum_{m'} \frac{V_{m'}^*}{\sqrt{N}} c_{k,m'} |m'\rangle \right), \end{aligned} \quad (2.63)$$

donde el término entre paréntesis es la componente k del hamiltoniano H_{mix} de la Ec. (2.11), y donde \mathcal{N} es la normalización. Esto define una nueva base completa y ortonormal para los electrones de conducción. Ahora simplemente se proyecta el hamiltoniano H_{mix} de la Ec. (2.14) en esta nueva base

$$\begin{aligned} H_{mix} &= \sum_{k,m} \frac{V_{k,m}}{\sqrt{N}} c_{k,m}^\dagger |0\rangle \langle m| + \text{H.c.} \\ &= \sum_k \left(\sum_m \frac{V_{k,m}}{\sqrt{N}} c_{k,m}^\dagger |0\rangle \langle m| \right) \left(\sum_{\tilde{m}} |\tilde{m}\rangle \langle \tilde{m}| \right) + \text{H.c.}, \\ &= \sum_{k,\tilde{m}} \mathcal{N} c_{k,\tilde{m}}^\dagger |0\rangle \langle \tilde{m}| + \text{H.c.}, \end{aligned} \quad (2.64)$$

donde se ha insertado la identidad $\mathbf{1} = \sum_{\tilde{m}} |\tilde{m}\rangle \langle \tilde{m}|$ y se ha utilizado la definición de la Ec. (2.63). Si se define un nuevo elemento de matriz

$$V_{\tilde{m}}/\sqrt{N} \equiv \mathcal{N}, \quad (2.65)$$

la expresión final de H_{mix} en términos de los estados corregidos tiene la misma forma que en la Ec. (2.11). Recordando la definición del parámetro $\Gamma_m = \pi\rho_c V_m^2$, podemos definir

$$\begin{aligned} \tilde{\Gamma}_{\tilde{m}} &= \pi\rho_c V_{\tilde{m}}^2, \\ &= \pi\rho_c N\mathcal{N}^2, \\ &= \pi\rho_c \sum_m V_m^2 |\langle m|\tilde{m}\rangle|^2, \end{aligned} \quad (2.66)$$

donde para llegar a la última expresión se utilizó $\{c_{k,m}, c_{k',m'}^\dagger\} = \delta_{m,m'}\delta_{k,k'}$ y la definición de la Ec. (2.63). Una propiedad que verifican los nuevos $\tilde{\Gamma}_{\tilde{m}}$ es

$$\sum_{\tilde{m}} \tilde{\Gamma}_{\tilde{m}} = \sum_m \Gamma_m, \quad (2.67)$$

como se puede ver de la Ec. (2.66) y recordando que los estados $|\tilde{m}\rangle$ y $|\bar{m}\rangle$ forman una base completa. Desarrollando la expresión final de la Ec. (2.66) a orden B^2 se tiene,

$$|\langle m|\tilde{m}\rangle|^2 \simeq \delta_{m,m'} - (g\mu_B B)^2 \sum_{m \neq m'} \frac{|\langle m|J_\alpha|m'\rangle|^2}{(\Delta_m - \Delta_{m'})^2}, \quad (2.68)$$

donde la suma no incluyen ningún estado degenerado con $|m\rangle$. De esta forma, la expresión de $\tilde{\Gamma}_{\tilde{m}}$ de la Ec. (2.66) a segundo orden es

$$\tilde{\Gamma}_{\tilde{m}} \simeq \Gamma_m + (g\mu_B B)^2 \sum_{m \neq m'} \frac{\Gamma'_m - \Gamma_m}{(\Delta_m - \Delta_{m'})^2} |\langle m|J_\alpha|m'\rangle|^2. \quad (2.69)$$

Reemplazando esta expresión en la Ec. (2.58), se obtiene la siguiente expresión de la susceptibilidad a $T = 0$

$$\begin{aligned} \chi_0 = & (g\mu_B)^2 \sum_m \left[n_{f,m} \frac{|\langle m|J_\alpha|m\rangle|^2}{\Delta_m + T_0} + 2 \sum_{m'} \frac{|\langle m|J_\alpha|m'\rangle|^2}{\Delta_m - \Delta_{m'}} + \right. \\ & \left. + \frac{T_0 + \Delta_m}{(\Delta_m - \Delta_{m'})^2} \ln \left(\frac{T_0 + \Delta_m}{T_0 + \Delta_{m'}} \right) \right], \quad (2.70) \end{aligned}$$

Densidad ρ_f

Exponemos a continuación el cálculo de la densidad espectral de estados f a $T = 0$ dentro del formalismo variacional de Gunnarson y Schönhammer [67, 68]. Éste método ha sido exitoso para analizar y estudiar una variada gama de experimentos de espectroscopía electrónica, tales como experimentos de fotoemisión de electrones de valencia (*“Valence Photoemission Spectroscopy”*) o espectros de efecto fotoeléctrico PES (*“Photoelectric Spectrum”*), que permiten medir la densidad de estados f ocupados, como así también experimentos de BIS (*“Bremsstrahlung Isochromat Spectroscopy”*), que permiten acceder a la densidad de estados f desocupados por encima del nivel de Fermi. Por otro lado, el cálculo de la densidad espectral cerca del nivel de Fermi es de interés en la física de los fermiones pesados, ya que permite estimar, por ejemplo, el valor de la constante de calor específico $\gamma = C/T|_{T=0}$, que se utiliza para caracterizarlos, como se mencionó en la Introducción (Cap. 1).

Comenzamos definiendo las funciones $G_{ff,m}^<(z)$ y $G_{ff,m}^>(z)$, los propagadores de un electrón f_m , para energías menores y mayores que el nivel de Fermi respectivamente, de tal manera que

$$G_{ff,m}(z) = G_{ff,m}^<(z) + G_{ff,m}^>(z). \quad (2.71)$$

Estas funciones surgen naturalmente al estudiar experimentos de fotoemisión. En la fotoemisión de electrones de valencia, se hace incidir un fotón muy energético sobre la muestra, lo que induce una transición del sistema desde su estado fundamental $|\psi_g(N_e)\rangle$ (con N_e electrones) a un estado $|\psi_n(N_e - 1)\rangle \otimes |\vec{k}\rangle$, donde un electrón absorbe suficiente energía para escapar del sólido hacia un estado de *“scattering”* $|\vec{k}\rangle$ y es emitido fuera del sistema, quedando éste en un estado excitado de $N_e - 1$ electrones. En la aproximación súbita se supone que el electrón

emitido no interactúa con los $N_e - 1$ restantes, algo razonable dado que la energía cinética de los electrones emitidos está típicamente en el rango de los 50 -1000 eV [56]. Usando la regla de oro de Fermi, se puede calcular la corriente de electrones emitidos a la energía ϵ como

$$P(\epsilon) \propto - \sum_{\vec{k}, n} \left| \langle \vec{k} | D_\alpha | m \rangle \right|^2 \delta(\epsilon - \epsilon_{\vec{k}}) \frac{\text{Im} G_{ff,m}^<(\epsilon - \hbar\omega + i0^+)}{\pi}, \quad (2.72)$$

donde $\hbar\omega$ es la frecuencia del fotón absorbido, D_α es el operador dipolo eléctrico, con el campo eléctrico en la dirección α , y

$$G_{ff,m}^<(z) = \langle \Psi_g | F_m^\dagger R(z) F_m | \Psi_g \rangle, \quad (2.73)$$

$$R(z) = \frac{1}{z - E_g + H_A}. \quad (2.74)$$

donde el operador $F_m = |0\rangle\langle m|$ se definió en la Sec. 2.3.1 y $R(z)$ es el operador resolvente utilizado anteriormente en la Ec. (2.15). Cualitativamente, el propagador $G_{ff,m}^<(z)$ mide la amplitud de probabilidad de destruir una partícula del estado $|m\rangle$ de la impureza y luego crearla en el mismo estado. Reemplazando la expresión de $|\Psi_g\rangle$ de la Ec. (2.46), se obtiene

$$G_{ff,m}^<(z) = \frac{\sum_k |b_{k,m}|^2}{|A|^2 + \sum_k |b_{k,m}|^2} \langle k | R(z) | k \rangle. \quad (2.75)$$

Utilizando la definición del operador resolvente $R(z)(z - E_g + H) = \mathbf{1}$, se puede encontrar la matriz de $R(z)$. Su evaluación se simplifica considerablemente utilizando el desarrollo en $1/N$, tomando el límite $N \rightarrow \infty$ y manteniendo constante el producto NV^2 . Siguiendo a Gunnarson y Schönhammer [67, 68], introducimos una base de estados de muchos cuerpos, con una partícula menos que $|\Psi_g\rangle$. Los estados de esta base son

$$|k\rangle \equiv |0\rangle c_{k,m} |FS\rangle, \quad (2.76)$$

$$|m', k, k'\rangle \equiv |m'\rangle c_{k',m'} c_{k,m} |FS\rangle. \quad (2.77)$$

La primera línea describe estados que tienen un hueco con impulso k y simetría m en la banda de conducción y ningún electrón en el nivel f , mientras que los estados de la segunda línea tienen dos huecos en la banda con impulso y simetría k', m' y k, m , respectivamente, y un electrón en el nivel $|m'\rangle$ (ver la primera línea Fig. 2.9 (a)). Estos estados constituyen el menor orden en $1/N$. Otros estados, obtenidos a partir de éstos mediante la aplicación del hamiltoniano H_A , contribuyen a un orden mayor en $1/N$ (línea inferior de la Fig. 2.9 (a)).

Los elementos diagonales de $R(z)$ son (ver Apéndice A.3.1)

$$R_{k,k}(\omega) = \left[\omega - \epsilon_k + \sum_{m'} \left[\frac{\Gamma_{m'}}{\pi} \ln \left| \frac{\omega - \epsilon_k + \Delta_{m'} + T_0}{\Delta_{m'} + T_0} \right| + i\Gamma_{m'} \theta(\epsilon_k - \omega - \Delta_{m'} - T_0) \right] \right]^{-1}. \quad (2.78)$$

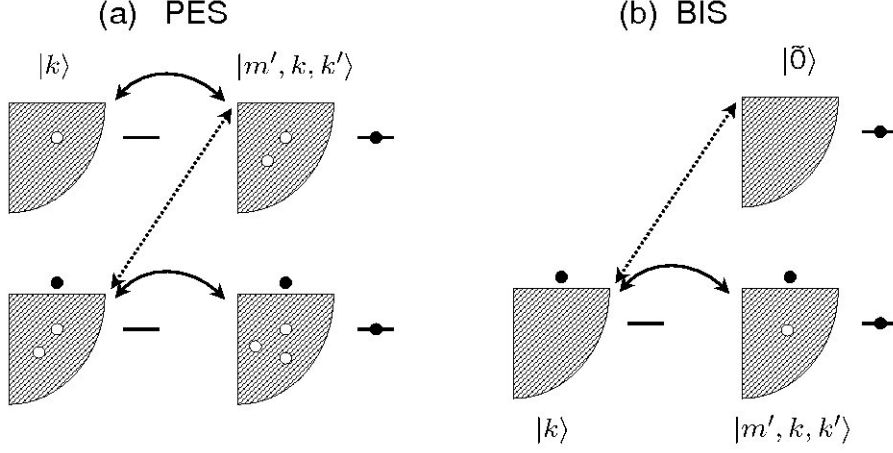


Figura 2.9: Representación esquemática de los estados base usados en la evaluación de espectros PES y BIS. Las flechas continuas indican los estados con N_e partículas que se mezclan mediante el término H_{mix} del hamiltoniano H_A a un mismo orden en $1/N$, mientras que las flechas discontinuas mezclan estados de distinto orden en el desarrollo en $1/N$.

Reemplazando en la Ec. (2.75) se obtiene (ver Apéndice A.3.1)

$$\begin{aligned}
 G_{ff,m}^<(\omega) &= (1 - n_f^0) \sum_k \frac{V_m^2}{N} \frac{1}{(\Delta_m + T_0 - \epsilon_k)^2} R_{k,k}(\omega), \\
 &= (1 - n_f^0) \frac{\Gamma_m}{\pi} \int_{-D}^0 d\epsilon \frac{1}{(\Delta_m + T_0 - \epsilon)^2} \times \\
 &\quad \times \frac{1}{\omega - \epsilon + \sum_{m'} \left[\frac{\Gamma_{m'}}{\pi} \ln \left| \frac{\omega - \epsilon + \Delta_{m'} + T_0}{\Delta_{m'} + T_0} \right| + i\Gamma_{m'} \theta(\epsilon - \omega - \Delta_{m'} - T_0) \right]}. \quad (2.79)
 \end{aligned}$$

Como puede verse fácilmente de esta expresión, si $-\omega < T_0$, en la integral sólo interviene el polo en $\epsilon = \omega$. Desarrollando cerca del punto $\epsilon = \omega$, se obtiene para el rango $-T_0 < \omega < 0$

$$G_{ff,m}^<(\omega) = (1 - n_f^0) \frac{\Gamma_m}{\pi} \int_{-D}^0 d\epsilon \frac{1}{(\Delta_m + T_0 - \epsilon)^2} \times \frac{1 - n_f^0}{\omega + i0^+ - \epsilon}, \quad (2.80)$$

$$G_{ff,m}^<(\omega) = \frac{(1 - n_f^0)^2 \Gamma_m}{\pi} \left[\left(\text{P} \int_{-D}^0 d\epsilon \frac{1}{(\Delta_m + T_0 - \epsilon)^2 (\omega - \epsilon)} \right) - \frac{i\pi}{(\Delta_m + T_0 - \omega)^2} \right], \quad (2.81)$$

donde en la última línea se utilizó la identidad $\frac{1}{x+i0^\pm} = \text{P} \left(\frac{1}{x} \right) \mp i\pi\delta(x)$. En particular, en el nivel de Fermi, la densidad $\rho_{fm}^<(\omega)$ es

$$\rho_{fm}^<(0) = \frac{\Gamma_m}{\pi} \frac{(1 - n_f^0)^2}{(\Delta_m + T_0)^2}. \quad (2.82)$$

Notamos que la función $\rho_{fm}^<(\omega)$ está calculada a orden $\mathcal{O}(1/N)$, lo que puede verse fácilmente recordando que la constante Γ_m está definida como $\Gamma_m = V_m^2 \rho_c / \pi$ y que el producto NV_m^2 es $\mathcal{O}(1)$. Por lo tanto $\Gamma_m = NV_m^2 \rho_c / (N\pi) \sim \mathcal{O}(1/N)$.

En el caso del espectro BIS, hay que calcular el propagador

$$G_{ff,m}^>(\omega) = \langle \Psi_g | F_m R(\omega) F_m^\dagger | \Psi_g \rangle, \quad (2.83)$$

donde ahora $R(\omega) = [\omega + E_g - H_A]^{-1}$. Análogamente al caso anterior, introducimos una base con una partícula más que $|\Psi_g\rangle$ (ver Fig. 2.9 (b))

$$|\tilde{0}\rangle \equiv |m\rangle |FS\rangle, \quad (2.84)$$

$$|k\rangle \equiv |0\rangle c_{k,m}^\dagger |FS\rangle, \quad (2.85)$$

$$|k, k', m'\rangle \equiv |m'\rangle c_{k,m}^\dagger c_{k',m'} |FS\rangle. \quad (2.86)$$

En este caso, la evaluación de la Ec. (2.83) da como resultado

$$G_{ff,m}^>(\omega) = A^2 \langle \tilde{0} | R(\omega) | \tilde{0} \rangle = (1 - n_f^0) R_{00}(\omega), \quad (2.87)$$

y procediendo como en el caso anterior (ver Apéndice A.3.1), se obtiene la expresión

$$G_{ff,m}^>(\omega) = \frac{(1 - n_f^0)}{\omega - \Delta_m - T_0 - \frac{\Gamma_m}{\pi} \int_0^D d\epsilon \frac{1}{\omega - \epsilon - \zeta(\epsilon, \omega)}}, \quad (2.88)$$

con

$$\zeta(\epsilon, \omega) = \sum_{m'} \frac{\Gamma_{m'}}{\pi} \left[\ln \left(\frac{\Delta_{m'} + T_0 + \epsilon - \omega}{\Delta_{m'} + T_0} \right) - i\pi\theta(\omega - \Delta_{m'} - T_0 - \epsilon) \right], \quad (2.89)$$

Nuevamente aquí notamos que en el rango $0 < \omega < T_0$, interviene solamente el polo $\epsilon = \omega$ en la integral del denominador. Especificando en ese rango, obtenemos

$$G_{ff,m}^>(\omega) = \frac{(1 - n_f^0)}{\omega + i0^+ - \Delta_m - T_0 + \frac{(1 - n_f^0)\Gamma_m}{\pi} \ln \left| \frac{D - \omega}{\omega} \right| + i(1 - n_f^0)\Gamma_m}, \quad (2.90)$$

La densidad de estados $\rho_{f,m}^>(\omega)$ es

$$\rho_{f,m}^>(\omega) = \frac{(1 - n_f^0)^2 \Gamma_m}{\pi} \frac{1}{\left[\omega - \Delta_m - T_0 - \frac{(1 - n_f^0)\Gamma_m}{\pi} \ln \left| \frac{D - \omega}{\omega} \right| \right]^2 + \left[(1 - n_f^0)\Gamma_m \right]^2}. \quad (2.91)$$

Notamos que este resultado tiene una divergencia logarítmica en el denominador para $\omega \rightarrow 0$, que se traduce en $\rho_{f,m}^>(0) = 0$, produciendo una discontinuidad en la densidad de estados f en el nivel de Fermi al comparar con la Ec. (2.82) (ver inset en la Fig. 2.10). Esta

discontinuidad tiene su origen en el hecho de haber truncado el desarrollo en $1/N$ a un orden finito. Desarrollando la Ec. (2.91) en potencias de $1/N$, se obtiene

$$\rho_{f,m}^>(\omega) \sim \frac{(1 - n_f^0)^2 \Gamma_m}{\pi} \left(\frac{1}{(\omega - \Delta_m - T_0)^2} + \mathcal{O}(1/N) + \dots \right). \quad (2.92)$$

De las Ecs. (2.82) y (2.92) vemos claramente que las densidades $\rho_{fm}^<(\omega)$ y $\rho_{fm}^>(\omega)$ se pegan suavemente en el nivel de Fermi $\omega = 0$ a orden $1/N$. Para cualquier valor de $\omega > 0$, en el límite $N \rightarrow \infty$, la discontinuidad desaparece.

Otra cosa interesante que se desprende de la Ec. (2.90), es que si despreciamos las correcciones de orden $\mathcal{O}(1/N)$ y superiores, se obtiene

$$\rho_{fm}^>(\omega) = (1 - n_f^0) \delta(\omega - T_0 - \Delta_m). \quad (2.93)$$

El formalismo variacional permite poner en evidencia que el término de orden $\mathcal{O}(1)$ en el desarrollo en $1/N$ contiene un estado de muchos cuerpos en la energía $\omega = T_0 + \Delta_m$ con respecto al nivel de Fermi, algo que podemos pensar como una resonancia de Kondo “rudimentaria”, con un peso de cuasipartícula $(1 - n_f^0)$. La incorporación de correcciones (términos de mayor orden en $1/N$) va corrigiendo gradualmente la densidad espectral, incorporando una vida media al estado de la Ec. (2.93) y suavizando la discontinuidad en E_F .

Notamos que el valor de $\rho_{fm}^<(0)$ dado por la Ec.(2.82) y el obtenido a partir de la regla de suma de Friedel [37]

$$\rho_{f,m}(0) = \frac{1}{\pi \Gamma_m} [\sin(\pi n_{f,m}^0)]^2. \quad (2.94)$$

tienden al mismo valor en el límite $n_{f,m}^0 \rightarrow 0$. Esto puede verse reemplazando la expresión de $n_{f,m}^0$ (Ec. (2.56))

$$n_{f,m}^0 = \frac{\Gamma_m(1 - n_f^0)}{\pi(T_0 + \Delta_m)}, \quad (2.95)$$

en la Ec. (2.94) y comparando con la Ec. (2.82). En un compuesto isotrópico (sin campo cristalino), el límite $N \rightarrow \infty$ implica que $n_{fm}^0 \rightarrow 0$, ya que la ocupación total $n_f^0 \leq 1$ y debe repartirse igualmente entre los N estados degenerados. En el caso de los compuestos de valencia intermedia, y para valores de $N \geq 4$, la función $\rho_{fm}^<$ verifica muy razonablemente la regla de suma de Friedel. Este hecho nos permite sugerir un método para subsanar la discontinuidad en E_F , basado en reajustar el valor del límite inferior en la integral de la Ec. (2.87) (es decir, buscar un nivel de Fermi “efectivo”) de tal forma de eliminar la divergencia logarítmica del denominador y lograr que $\rho_{f,m}^>(0^+)$ verifique el valor dado por la regla de suma de Friedel. Físicamente, un nivel de Fermi efectivo menor simula de alguna manera la incorporación de estados con una cierta población de electrones en la parte superior de la banda de conducción, lo que constituye una aproximación a la incorporación rigurosa de estados de mayor orden en $1/N$ con más excitaciones electrónicas sobre el nivel de Fermi (ver Fig. 2.9 (b)).

Una aplicación de este método a un caso concreto puede verse en el inset de la Fig. 2.10, para la cual se utilizaron los parámetros de la Tabla 2.1. La estructura de niveles en este caso es un octuplete $J = 7/2$ desdoblado en dos cuadrupletes por el campo cristalino, separados por una energía $\Delta = 400$ K. En línea punteada se muestra la función $\rho_f(\omega) = \sum_m(\rho_{fm}^<(\omega) + \rho_{fm}^>(\omega))$ no corregida, mientras que la línea continua muestra la misma función corregida. A pesar de subsanar significativamente la discontinuidad original en E_F , una discontinuidad de $\sim 4\%$ persiste debido a que la regla de suma se verifica sólo aproximadamente. Las resonancias en la figura representan resonancias de Kondo, generalizadas para el caso en que el multiplete no está degenerado. La estructura dada por el campo cristalino se traslada a la densidad $\rho_f(\omega)$ cerca de E_F , en concordancia con los resultados obtenidos mediante la implementación de la NCA [1]. A pesar de no distinguirse en la Fig. 2.10, este cálculo variacional de la densidad a orden $1/N$ permite describir aproximadamente las resonancias de transferencia de carga de ancho $\sim N\Gamma_m$, que se encuentran a una energía del orden de $\epsilon_{fm} \simeq -2000$ K, originadas por un mínimo en el denominador de la integral en la expresión de $G_{ff,m}^<(\omega)$ (ver Ec. (2.79)).

Con el conocimiento de $G_{ff,m}(z) = G_{ff,m}^<(z) + G_{ff,m}^>(z)$, se puede encontrar la autoenergía $\Sigma_{ff,m}(z)$

$$G_{ff,m}(z) = \frac{1}{z - \Sigma_{ff,m}(z)}, \quad (2.96)$$

y de aquí, utilizando el hecho de que a $T \rightarrow 0$ el sistema es un líquido de Fermi, obtenemos el *peso de cuasipartícula* $z_m = (1 - \partial \text{Re}[\Sigma_{ff,m}(\omega)]/\partial \omega)^{-1}|_{\omega=E_F}$. Estas cantidades entran en la expresión de la constante γ para un líquido de Fermi [56]

$$\gamma = \left. \frac{C}{T} \right|_{T=0} = \frac{\pi^2 k_B^2}{3} \sum_m \frac{\rho_{f,m}(E_F)}{z_m}. \quad (2.97)$$

2.4.3 Cálculo de propiedades a $T > 0$

El punto inicial de esta discusión se basa en el caso $V = 0$. En ese límite, puede verse fácilmente que las densidades espectrales son

$$\rho_m^{(0)}(\omega) = \delta(\omega - \epsilon_{fm}), \quad (2.98)$$

Insertando esta solución en las Ecs. (2.26) y (2.27) de la autoenergía, para V pequeño pero distinto de cero, se obtienen las expresiones para $\Sigma_0^{(1)}$ y $\Sigma_m^{(1)}$, corregidas a primer orden en la hibridización V . Con las expresiones de $\Sigma_0^{(1)}$ y $\Sigma_m^{(1)}$ pueden obtenerse las densidades espectrales corregidas

$$\begin{aligned} \rho_0^{(1)}(\omega) &= \frac{1}{\pi} \frac{\text{Im}\Sigma_0^{(1)}(\omega, T)}{\left[\omega - \text{Re}\Sigma_0^{(1)}(\omega, T)\right]^2 + \left[\text{Im}\Sigma_0^{(1)}(\omega, T)\right]^2}, \\ \rho_m^{(1)}(\omega) &= \frac{1}{\pi} \frac{\text{Im}\Sigma_m^{(1)}(\omega, T)}{\left[\omega - \text{Re}\Sigma_m^{(1)}(\omega, T)\right]^2 + \left[\text{Im}\Sigma_m^{(1)}(\omega, T)\right]^2}. \end{aligned} \quad (2.99)$$

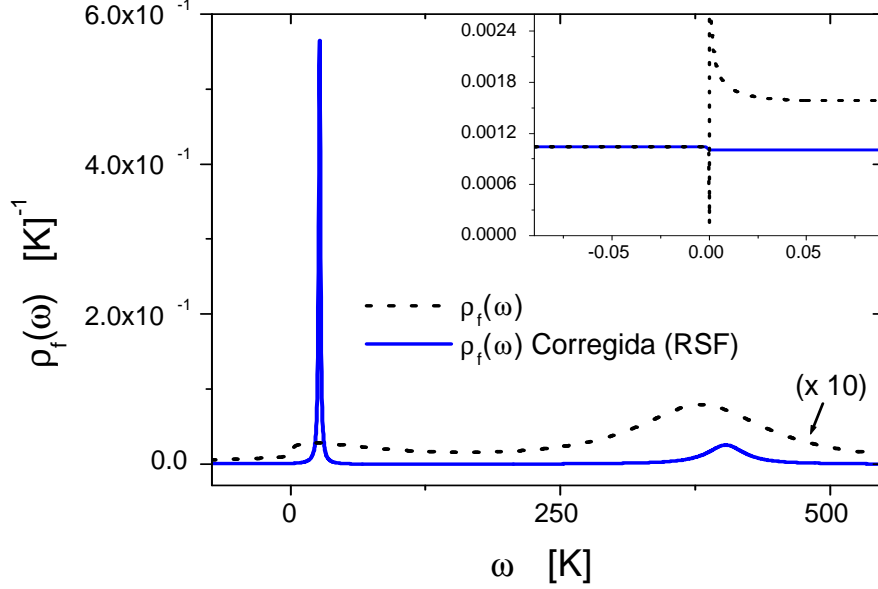


Figura 2.10: Resultados de la densidad espectral $\rho_f(\omega)$ a $T = 0$. En línea continua se muestran los resultados corregidos imponiendo la regla de suma de Friedel (Ec. (2.94)).

Este procedimiento puede repetirse para encontrar $\Sigma_0^{(2)}$ y $\Sigma_m^{(2)}$, y luego $\rho_0^{(2)}$ y $\rho_m^{(2)}$, y así sucesivamente hasta la lograr la convergencia en las densidades ρ_0 y ρ_m .

La aproximación al desarrollo autoconsistente de la NCA propuesta por Zwicknagl, Zevin y Fulde [66] consiste en detener el proceso iterativo en el primer paso para las funciones ρ_m , y para el caso de la función ρ_0 , se utiliza el resultado del método variacional (Sec. 2.4.1): como puede verse fácilmente de la Ec. (2.99), la función $\rho_0^{(1)}(\omega)$ presenta resonancias cuando se verifica

$$\omega - \text{Re}\Sigma_0^{(1)}(\omega, T) = 0, \quad (2.100)$$

Como se demuestra en el Apéndice A.4, esta ecuación es exactamente la misma que resolvimos para encontrar la energía del estado fundamental E_g con el método variacional de la Sec. 2.4.1 (Ec. (2.51)). Basándose en este hecho, la aproximación que propusieron Zwicknagl, Zevin y Fulde para $\rho_0(\omega)$ es [66]

$$\rho_0(\omega) = (1 - n_f^0)\delta(\omega - E_g), \quad (2.101)$$

donde los valores de n_f^0 y E_g están dados por el método variacional, y donde el factor $1 - n_f^0$ representa el peso espectral del estado vacío, calculado a orden $\mathcal{O}(1)$ en el desarrollo en potencias de $1/N$ [67]. Aproximando de esta manera, se ve claramente que desaparecen las no analiticidades de la NCA en el límite $T \rightarrow 0$, y por construcción, las propiedades convergen suavemente al valor de $T = 0$, que por estar calculadas mediante el método variacional, son exactas en el límite $N \rightarrow \infty$. Además, se elimina por completo la necesidad técnica de proceder autoconsistentemente, ya que se parte de resultados analíticos a $T = 0$.

Esta aproximación sólo describe las fluctuaciones del spin, que están relacionadas con la solución $\omega = E_g$. Como se mencionó anteriormente, existen otras soluciones a la Ec.(2.100) que describen las fluctuaciones de la carga en el nivel f , que aparecen recién a orden $\mathcal{O}(1/N)$. Por otro lado, también se mencionó el hecho que en la NCA, la función $\rho_0(\omega)$ tiene resonancias en las energías de carga $\simeq \epsilon_{f,m}$, con un cierto ancho característico. En este caso, la densidad $\rho_0(\omega)$ se está aproximando por una función delta, y por consiguiente, se pierden algunos detalles. Este hecho está justificado dado que la mayoría de las propiedades calculadas aparecen en forma de convoluciones de las densidades $\rho_0(\omega)$ y $\rho_m(\omega)$, razón por la cual el detalle en estas cantidades, que no son experimentalmente medibles, no es demasiado importante. Por otro lado, el hecho de considerar una aproximación a $\rho_0(\omega)$ independiente de T , sólo puede ser válido mientras $T < T_0$. Estas consideraciones restringen el uso de la presente aproximación a las situaciones en que $\{\omega, T\} < T_0$.

Insertando la expresión de la Ec. (2.101) en las Ecs. (2.26), (2.27), (2.23) y (2.24), se obtiene [66]

$$\rho_m(\omega, T) = \frac{1}{\pi} \frac{(1 - n_f^0) \Gamma_m n_F(E_g - \omega)}{[\omega - \epsilon_{f,m}]^2 + \left[(1 - n_f^0) \Gamma_m n_F(E_g - \omega) \right]^2}, \quad (2.102)$$

donde la dependencia en T se produce a través de las funciones de Fermi $n_F(\omega)$. Como es usual en estos casos, se despreció la variación de $\text{Re}\Sigma_m(\omega, T)$. Esto está justificado ya que generalmente, los parámetros $\epsilon_{f,m}$ se fitean de acuerdo al experimento, de modo tal que puede suponerse que el valor final de $\epsilon_{f,m}$ contiene una renormalización dada por $\epsilon_{f,m} = \epsilon_{f,m}^0 + \text{Re}\Sigma_m(\omega, T)$, suponiendo que puede despreciarse la dependencia en ω .

Esta aproximación sólo cumple aproximadamente la regla de suma

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\omega \rho_m(\omega, T) = 1, \quad (2.103)$$

verificándose las desviaciones más importante a $T = 0$ [66].

Habiendo expuesto las soluciones aproximadas a las ecuaciones de la NCA, procedemos a mostrar los resultados de algunas propiedades termodinámicas a $T > 0$.

Valencia del nivel f

Partimos de la Ec. (A.8) del Apéndice A.1

$$n_{f,m}(T) = \frac{1}{Z_f} \int_{-\infty}^{\infty} d\epsilon e^{-\beta\epsilon} \rho_m(\epsilon), \quad (2.104)$$

donde

$$Z_f = \sum_m \int_{-\infty}^{\infty} d\epsilon e^{-\beta\epsilon} \rho_m(\epsilon) + \int_{-\infty}^{\infty} d\epsilon e^{-\beta\epsilon} \rho_0(\epsilon). \quad (2.105)$$

Haciendo un cambio de variables, la Ec. (2.104) se puede expresar esto como

$$n_{f,m}(T) = \frac{\Gamma_m I_m}{\sum_m \Gamma_m I_m + 1}, \quad (2.106)$$

donde

$$I_m = \int_{-\infty}^{\infty} d\epsilon \frac{1}{\pi} \frac{n_F(\epsilon)}{[\omega - T_0 - \Delta_m]^2 + [\Gamma_m(1 - n_f^0)n_F(-\epsilon)]^2}, \quad (2.107)$$

resulta de la aproximación Ec. (2.102) a la densidad ρ_m [66]. Con esta notación puede escribirse la función de partición Z_f como

$$Z_f = e^{-\beta E_g} (1 - n_f^0) \left(\sum_m \Gamma_m I_m + 1 \right). \quad (2.108)$$

2.4.4 Susceptibilidad estática y dinámica a $T > 0$

En lugar de calcular la susceptibilidad magnética estática a partir de la Ec. (2.45) para el límite $\omega \rightarrow 0$, se puede partir de la expresión de la energía libre de Helmholtz [9]. Usando la Ec. (2.108), obtenemos

$$F = k_B T \ln Z_f = E_g - k_B T \ln (1 - n_f^0) - k_B T \ln \left(\sum_m \Gamma_m I_m + 1 \right). \quad (2.109)$$

y usar la relación $M = -\partial F / \partial B$ [9], con lo que se obtiene

$$M = -\frac{\partial E_g}{\partial B} - k_B T \frac{1}{1 - n_f^0} \frac{\partial n_f^0}{\partial B} + k_B T \frac{1}{\sum_m \Gamma_m I_m + 1} \sum_m \left(\frac{\partial I_m}{\partial B} \Gamma_m + \frac{\partial \Gamma_m}{\partial B} I_m \right). \quad (2.110)$$

Finalmente, utilizando $\chi = \partial M / \partial B|_{B=0}$ [9] se obtiene [66]

$$\chi = \chi_0 - k_B T \left(\frac{1}{1 - n_f^0} \right) \frac{\partial^2 n_f^0}{\partial B^2} + k_B T \left(\frac{1}{\sum_m \Gamma_m I_m + 1} \right) \sum_m \left(\frac{\partial^2 I_m}{\partial B^2} \Gamma_m + \frac{\partial^2 \Gamma_m}{\partial B^2} I_m \right), \quad (2.111)$$

donde se utilizó la simetría de reversión temporal

$$\left. \frac{\partial n_f^0}{\partial B} \right|_{B=0} = \left. \frac{\partial I_m}{\partial B} \right|_{B=0} = \left. \frac{\partial \Gamma_m}{\partial B} \right|_{B=0} = 0. \quad (2.112)$$

Como vemos, en la Ec. (2.111) es necesario conocer las derivadas segundas $\partial^2 n_f^0 / \partial B^2$, $\partial^2 \Gamma_m / \partial B^2$ y $\partial^2 I_m / \partial B^2$. La obtención de dichas expresiones se encuentra en el Apéndice A.2. La susceptibilidad dinámica se obtiene simplemente reemplazando en la Ec. (2.45) las expresiones que se obtuvieron para ρ_m en la Ec. (2.102) y evaluando numéricamente las integrales en frecuencia.

2.5 Comparación con resultados experimentales

En las últimas dos décadas se ha realizado un notable esfuerzo en tratar de entender a las redes de Kondo basadas en Ce, debido a la gran variedad de comportamientos surgidos de las fuertes correlaciones electrónicas. El Ce tiene una estructura electrónica del tipo $(5s6p)^0 4f^1$ en su configuración Ce^{+3} , y fluctúa con la configuración Ce^{+4} cuya estructura electrónica es $(5s6p)^0 4f^0$. Un comportamiento análogo se espera para el Yb, considerado como la “versión en huecos” del Ce. La configuración del Yb fluctúa entre $(5s6p)^0 4f^{14}$ para el Yb^{+2} y $(5s6p)^0 4f^{13}$ para el Yb^{+3} . Sin embargo, la gran dificultad para generar compuestos de Yb, debido a su gran presión de vapor, ha imposibilitado realizar comparaciones sistemáticas con el Ce [72]. Recientemente se han logrado sintetizar monocristales basados en la serie $Yb_2M_3X_9$, con $M=Co,Rh,Ir$ y $X=Ca,Al$; que cristalizan con estructura ortorrómbica del tipo del $Y_2Co_3Ga_9$ [72]. Estos compuestos presentan valencia intermedia para $M=Ga$ y orden antiferromagnético para $M=Al$. En general, en el caso de los compuestos de valencia intermedia, generalmente la escala de energía T_K es mayor que Δ , la separación de niveles por el campo cristalino, lo que tiende a hacer que las propiedades sean isotrópicas. Normalmente, despreciar Δ frente a T_K es una aproximación razonable en los compuestos de valencia intermedia [73]. El caso de estos metales recientemente sintetizados es atípico en el sentido que la escala de energía T_K es comparable a Δ , razón por la cual es necesario incorporar este parámetro en la descripción teórica.

A continuación mostramos una serie de resultados del modelo descrito en las secciones anteriores para tratar de caracterizar cuantitativamente a estos compuestos.

2.5.1 Susceptibilidad estática

En esta sección se muestran los resultados del modelo y su comparación con los resultados experimentales para la susceptibilidad estática de los compuestos $Yb_2M_3Ga_9$, con $M=(Rh, Ir)$, y el compuesto $Yb_3Ni_5Al_{19}$. Estos compuestos presentan valencia intermedia a la vez que fuertes efectos de la anisotropía cristalina, con energías típicas comparables a la temperatura de Kondo T_K . En la Fig. 2.11 se presentan los resultados experimentales para la susceptibilidad estática paralela y perpendicular en función de T para el compuesto $Yb_2Rh_3Ga_9$ (círculos) [70]. También se muestra un resultado del ajuste obtenido con la aproximación a la NCA propuesta por Zwicky, Zevin y Fulde [66].

La simetría cristalina hexagonal del compuesto permite asegurar que la degeneración inicial $N = 8$ (la interacción spin-órbita deja un multiplete fundamental $J = 7/2$ en el átomo de Yb^{+3}) de la configuración f^1 se rompe completamente dejando un esquema de niveles de 4 dobletes de Kramers. El máximo pronunciado de χ_{par} en $T \sim 100$ K sugiere una degeneración efectiva importante. Esto surge de una comparación cualitativa con los resultados obtenidos mediante un ajuste con el método de Bethe ansatz [74], que supone una situación de completa simetría. Sin embargo, la diferencia entre los datos obtenidos para χ_{par} y χ_{perp} indica simultáneamente la presencia de una fuerte anisotropía como consecuencia del campo cristalino. Para simplificar los cálculos, se realizó la aproximación adicional de suponer que los autoestados del hamiltoniano total H_f incluyendo el campo cristalino (Ec. (2.11)), son también autoestados de J_z . Los autoestados verdaderos del campo cristalino son

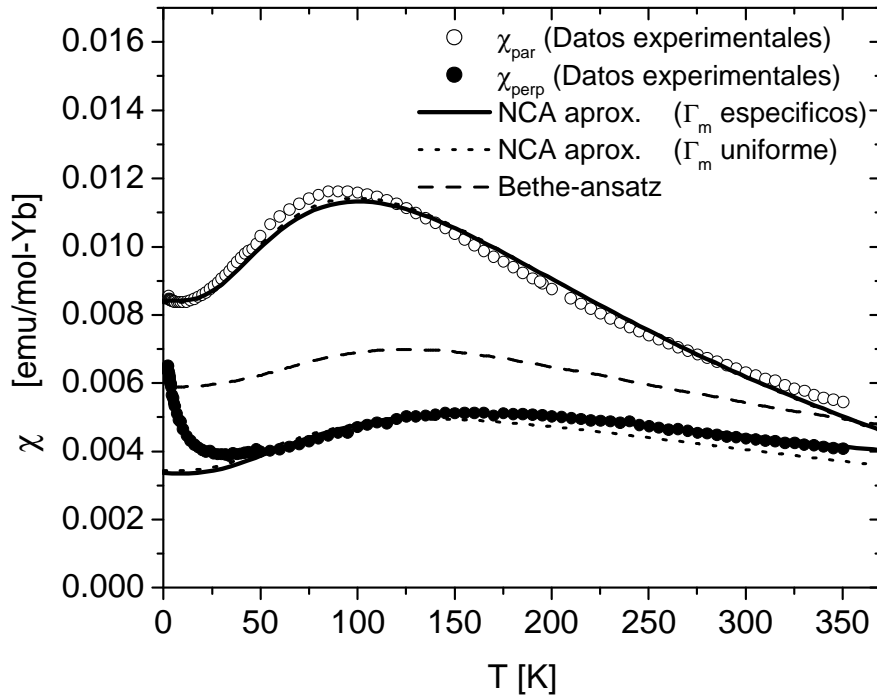


Figura 2.11: Resultados experimentales de susceptibilidad estática paralela y perpendicular en función de T para el compuesto $\text{Yb}_2\text{Rh}_3\text{Ga}_9$ (círculos). Las líneas continuas son los resultados teóricos del modelo utilizando los parámetros de la Tabla 2.1. En líneas punteadas se muestran los mismos resultados, suponiendo una hibridización uniforme $\Gamma_m = 165$ K para todo m , manteniendo el resto de los parámetros iguales a los de la Tabla 2.1. A los efectos de la comparación, se muestra también (línea de trazos) el resultado de la curva de Rajan, obtenido con Bethe-ansatz (Ref. [74]) suponiendo degeneración completa del multiplete [70].

en realidad una combinación lineal de los autoestados de J_z . Esta aproximación corresponde a realizar una identificación del autoestado $|i\rangle$ del campo cristalino con el autoestado $|m\rangle$ del operador J_z , de acuerdo a la menor diferencia existente entre $\langle i|J_z|i\rangle$ y m .

Para reproducir las características del experimento mencionadas más arriba, propusimos un esquema de niveles de campo cristalino para la impureza aislada basado en un cuádruplete fundamental, formado por los estados con máxima proyección de momento angular $|\pm 7/2\rangle$ y $|\pm 5/2\rangle$ ($\Delta_{\pm 7/2} = \Delta_{\pm 5/2} = 0$), y un cuádruplete excitado con los estados $|\pm 3/2\rangle$ y $|\pm 1/2\rangle$ ($\Delta_{\pm 3/2} = \Delta_{\pm 1/2} = \Delta$). La elección de un cuádruplete fundamental con máxima proyección de m permite explicar la susceptibilidad paralela más grande, y a la vez, un máximo pronunciado. Por otro lado, esto evita la introducción de parámetros de ajuste adicionales. Las subidas en la susceptibilidad a muy bajas temperaturas son todavía materia de discusión. Podría tratarse de efectos extrínsecos (por ej: impurezas en las muestras) o intrínsecos (efectos de la red); ambos casos están fuera del alcance del presente modelo y no intentaremos dar una explicación a ello. Por esta razón, se ajustaron los parámetros del modelo para reproducir los datos experimentales en el rango $T > 50$ K. Los parámetros que

Parámetro	Valor
$\Gamma_{\pm 1/2} = \Gamma_{\pm 3/2}$	145 K
$\Gamma_{\pm 5/2} = \Gamma_{\pm 7/2}$	170 K
$\Delta_{\pm 1/2} = \Delta_{\pm 3/2}$	400 K
n_f^0	0.59
I	25 mol/emu

Tabla 2.1: Parámetros de ajuste del modelo correspondientes al compuesto $\text{Yb}_2\text{Rh}_3\text{Ga}_9$ (ver Fig. 2.11).

mejor ajustan los resultados experimentales se muestran en la Tabla 2.1.

Como puede verse en la Fig. 2.11, la introducción de parámetros $\Gamma_m(B)$ específicos para cada m y dependientes del campo magnético B (líneas continuas) genera mejores ajustes en la susceptibilidad. En este caso, la temperatura de estabilización del singlete es de $T_0 = 198.9$ K. Para poder comparar con el ajuste obtenido con Bethe-ansatz [74], se debe utilizar la relación entre escalas de energía $T_K = T_0 \times (2J + 1)/2\pi n_f = 429.0$ K, que surge de comparar los resultados de las Ref. [74] y [66]. Vemos que, mas allá de un factor $\simeq 2$, ambos resultados confirman el hecho que las escalas de energía del campo cristalino ($\Delta = 400$ K) y T_K son del mismo orden, y no es correcto realizar un cálculo despreciando una de ellas.

Los ajustes mejoran notablemente con la inclusión de una interacción antiferromagnética a primeros vecinos. Varios miembros de la familia $\text{Yb}_2\text{M}_3\text{X}_9$ muestran orden antiferromagnético, sin embargo, como ya se ha señalado, en los compuestos de valencia intermedia predomina la interacción de Kondo local frente a las interacciones entre sitios, al menos para temperaturas superiores a 10 K, como sugieren los datos experimentales de χ_{par} mostrados en la Fig. 2.11. Esto sugiere que los efectos de la red, aunque de menor magnitud que los efectos locales, deben incluirse para lograr un acuerdo cuantitativo. Se supuso un hamiltoniano tipo Heisenberg para incluir las interacciones magnéticas a primeros vecinos entre los momentos localizados

$$H_H = \mathcal{J}_H \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{J}_i \cdot \vec{J}_j, \quad (2.113)$$

sumado a todos los términos del hamiltoniano de la Ec. (2.11), y posteriormente realizamos una aproximación de campo medio. Partiendo de [9, 14]

$$\vec{M}_i = g\mu_B \langle \vec{J}_i \rangle, \quad (2.114)$$

donde \vec{M}_i es la magnetización de una subred. Usando la relación [9, 14]

$$\begin{aligned} \vec{M}_i &= \chi^{(0)} \vec{B}_{eff} \\ &= \chi^{(0)} \left(\vec{B}_{ext} - \frac{z\mathcal{J}_H}{gJ\mu_B} \langle \vec{J}_i \rangle \right), \\ &= \chi^{(0)} \left(\vec{B}_{ext} - \frac{z\mathcal{J}_H}{(gJ\mu_B)^2} \vec{M}_i \right), \end{aligned} \quad (2.115)$$

Parámetro	Valor
Γ	230 K
Δ	280 K
n_f^0	0.53
I	45 mol/emu

Tabla 2.2: Parámetros de ajuste del modelo correspondientes al compuesto $\text{Yb}_2\text{Ir}_3\text{Ga}_9$ (ver Fig. 2.12).

donde $\chi^{(0)}$ es la susceptibilidad dada por la Ec. (2.111), z es el número de momentos localizados vecinos y el signo menos proviene del hecho que las subredes tienden a orientarse en direcciones opuestas. Finalmente, de la relación $\vec{M}_i = \chi \vec{B}_{ext}$, se obtiene el resultado final

$$\chi = \frac{\chi^{(0)}}{1 + I\chi^{(0)}}, \quad (2.116)$$

donde la constante I no debe ser confundida con las integrales I_m definidas en la Ec. (2.107) y está dada por $I \equiv z\mathcal{J}_H/(g\mu_B)^2$. Esta cantidad es otro parámetro de ajuste y su valor puede encontrarse en la Tabla 2.1. Como se ve en la Ec. (2.116), el efecto de las interacciones entre momentos localizados es de disminuir el valor de la susceptibilidad, lo cual es razonable, ya que el efecto de interacción con la otra subred es de disminuir el campo efectivo que ve cada uno de los momentos localizados.

El término de Heisenberg introducido en la Ec. (2.113) es simplemente una aproximación para considerar los efectos de las interacciones magnéticas entre iones. Como se mencionó en la Introducción (Cap. 1), en el complejo problema de la red de Kondo, el orden magnético y el efecto Kondo tienen en última instancia el mismo origen, y estrictamente no es correcto introducir una interacción externa al modelo en sí. Sin embargo, una comparación entre las escalas de energía $T_K = 550$ K y la escala de energía inducida por el término de Heisenberg de la Ec. (2.113) en la aproximación de campo medio, $T_N = \chi_{par}^{(0)}(T_{max})I \simeq 30$ K, donde $T_{max} \simeq 100$ K es el máximo de χ_{par} , permite demostrar que las interacciones entre momentos magnéticos constituyen una pequeña corrección a la energía del estado fundamental.

El valor de la valencia en la impureza es en este caso $n_f^0 = 0.59$. Esto sugiere un importante efecto de las fluctuaciones de carga, desviándose considerablemente del valor $n_f^0 \simeq 1$ del régimen de Kondo. Esto permite corroborar otras mediciones que indican que $\text{Yb}_2\text{Rh}_3\text{Ga}_9$ se trata de un compuesto de valencia intermedia.

A continuación, en la Fig. 2.12, se muestran los resultados para el compuesto $\text{Yb}_2\text{Ir}_3\text{Ga}_9$. En este caso, los resultados experimentales indican una anisotropía menor (mayor similitud entre χ_{par} y χ_{perp}) y máximos más ensanchados, lo que indica cualitativamente un Δ menor y Γ_m mayores. Para este caso se propone un esquema de niveles similar al caso del $\text{Yb}_2\text{Rh}_3\text{Ga}_9$, aunque la mayor hibridización hace innecesaria la utilización de Γ_m específicos para cada doblete, razón por la cual hemos supuesto en este caso $\Gamma_m = \Gamma$. En la Tabla 2.2 se indican los valores de los parámetros de ajuste. En comparación con el compuesto de Rh, se observa efectivamente un aumento en la hibridización Γ y una disminución de Δ . El valor de $T_0 = 424.6$ K ($T_K = 1029.8$ K) es aproximadamente el doble que en el caso del compuesto de Rh,

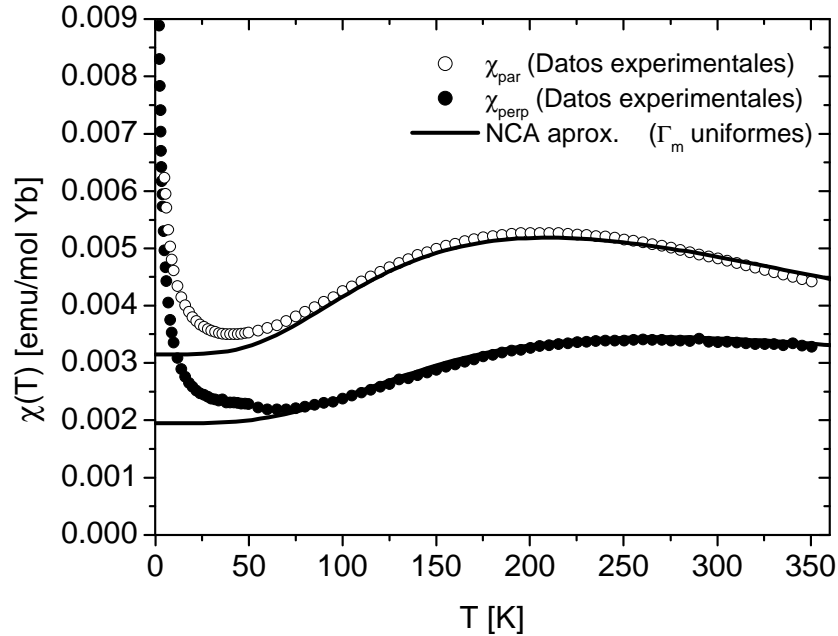


Figura 2.12: Resultados experimentales de susceptibilidad estática paralela y perpendicular en función de T para el compuesto $\text{Yb}_2\text{Ir}_3\text{Ga}_9$ (Ref. [70]). Las líneas son los resultados teóricos utilizando los parámetros de ajuste de la Tabla 2.2.

y la valencia $n_f^0 = 0.53$ es menor, lo que es consistente con un aumento de T_0 , según la Ec. (2.57). Todo indica entonces que el compuesto de Ir presenta más fluctuaciones de carga que el de Rh.

En la Fig. 2.13, se muestran datos experimentales de susceptibilidad magnética de $\text{Yb}_3\text{Ni}_5\text{Al}_{19}$ y un ajuste con el modelo (línea continua), cuyos parámetros se presentan en la Tabla 2.3.

En este caso la muestra es un polvo, razón por la cual para comparar con los experimentos, la susceptibilidad calculada teóricamente debió ser promediada en las tres direcciones. El alto valor obtenido para $I = 250$ mol/emu (comparativamente mucho mayor que en los compuestos anteriormente estudiados) sugiere la presencia de fuertes correlaciones antiferromagnéticas, lo que ha sido corroborado experimentalmente ajustando la susceptibilidad de alta temperatura (donde puede despreciarse el efecto Kondo) con una ley de Curie-Weiss, obteniéndose una temperatura de Curie-Weiss $T_{CW} = -731$ K [72].

Utilizando un ajuste con Bethe-ansatz (línea a trazos en la Fig. 2.13), se obtiene una discrepancia importante para $T > 100$ K con respecto a los datos experimentales. Dado que el cálculo con Bethe-ansatz utilizado supone la completa degeneración del multiplete, dicha discrepancia sugiere la presencia de efectos del campo cristalino. En el ajuste teórico obtenido, los efectos del desdoblamiento del multiplete $J = 7/2$ son muy pequeños y se han despreciado ($\Delta = 0$). Sin embargo, los efectos del campo cristalino se evidencian en los diferentes acoplamientos Γ_m (ver Tabla 2.3).

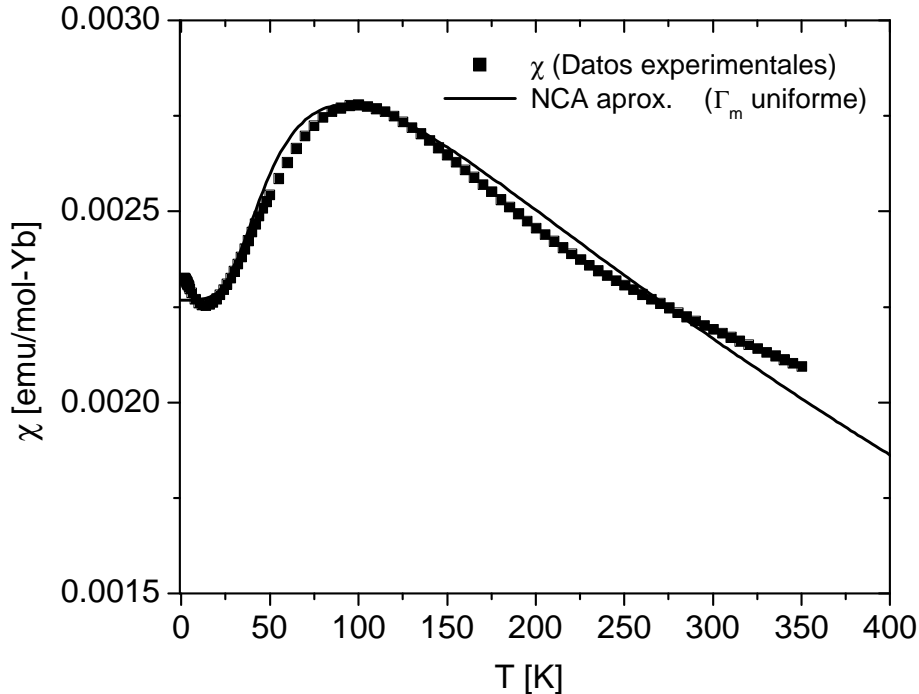


Figura 2.13: Resultados experimentales de susceptibilidad estática paralela y perpendicular en función de T para el compuesto $\text{Yb}_3\text{Ni}_5\text{Al}_{19}$ (Ref. [72]). La línea continua es el resultado del modelo, utilizando los parámetros de ajuste de la Tabla 2.3.

La T_0 obtenida es 217.9 K ($T_K = 616.4$ K) y el valor de $n_f^0=0.45$, junto con las características generales de la susceptibilidad (saturación a bajas temperaturas y máximo ensanchado) y de otras mediciones experimentales [72], son un fuerte indicio de que $\text{Yb}_3\text{Ni}_5\text{Al}_{19}$ es un compuesto de valencia intermedia.

En general, los ajustes se deterioran para $T \geq T_0$, como puede verse en las Figs. 2.11, 2.12 y 2.13, lo que es esperable dado la naturaleza de la aproximación de Zwicknagl, Zevin y Fulde [66]. Para acceder a este rango de temperaturas es necesario implementar la NCA completa [1, 59].

2.5.2 Dispersión inelástica de neutrones en $\text{Yb}_2\text{Rh}_3\text{Ga}_9$

Este experimento mide directamente las excitaciones magnéticas dinámicas que produce un neutrón con su spin al atravesar el material, y por consiguiente, está íntimamente relacionado con la susceptibilidad dinámica que hemos derivado en la Sec. 2.3.1.

La sección eficaz de la dispersión de neutrones se calcula como [56]

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega d\omega} = N_{ion} \left(\frac{\gamma e^2}{mc^2} \right) \frac{k}{k'} S(\vec{q}, \omega), \quad (2.117)$$

Parámetro	Valor
$\Gamma_{\pm 1/2} = \Gamma_{\pm 3/2}$	90 K
$\Gamma_{\pm 5/2} = \Gamma_{\pm 7/2}$	50 K
Δ	0 K
n_f^0	0.45
I	250 mol/emu

Tabla 2.3: Parámetros de ajuste del modelo correspondientes al compuesto $\text{Yb}_3\text{Ni}_5\text{Al}_{19}$ (ver Fig. 2.13 en línea continua).

donde N_{ion} es la concentración de iones magnéticos, $\gamma e^2/mc^2$ es la constante de acoplamiento, k y k' son los módulos de los vectores de onda incidente y saliente, respectivamente. La función de “scattering” $S(\vec{q}, \omega)$ se relaciona con la parte imaginaria de la susceptibilidad dinámica $\chi(\omega)$, y toma la forma

$$S(\vec{q}, \omega) = \frac{2}{\pi} \frac{F^2(\vec{q})}{1 - e^{-\omega/T}} \frac{\text{Im}\chi(\omega)}{(g\mu_B)^2}, \quad (2.118)$$

para momentos magnéticos independientes, donde $F(\vec{q})$ es el factor de forma y donde $\chi(\omega)$ es la susceptibilidad magnética para una impureza magnética aislada, dada por la Ec. (2.45). Los neutrones son colimados y filtrados en energía, pero las muestras no son monocristalinas sino en polvo, razón por la cual es necesario promediar los resultados teóricos en las tres direcciones.

A continuación se muestran resultados experimentales de dispersión de neutrones en $\text{Yb}_2\text{Rh}_3\text{Ga}_9$. En la Fig. 2.14 se muestran los resultados experimentales de la función de dispersión $S(\vec{q}, \omega)$ tomados a $T = 12$ K (Fig. 2.14 (a)) y $T = 300$ K (Fig. 2.14 (b)) para distintas energías del haz de neutrones incidente y se grafican en función de la energía transferida ΔE [75]. Los datos han sido tomados para ángulos de dispersión Θ (formado por los vectores \vec{k} y \vec{k}') bajos para minimizar el error experimental. La diferencia de energía ΔE es absorbida por el material en forma de excitaciones magnéticas y fonones, principalmente. Dado que para el presente estudio sólo interesan las excitaciones magnéticas, se sustrajeron las otras contribuciones mediante una comparación con una muestra de referencia de $\text{Y}_2\text{Rh}_3\text{Ga}_9$, donde los átomos magnéticos de Yb han sido reemplazados por átomos no magnéticos de Y (yttrio). El método experimental utilizado para restar la contribución de los fonones a ángulos de dispersión bajos se basa en determinar, con el análogo no magnético $\text{Y}_2\text{Rh}_3\text{Ga}_9$, un factor de escala dependiente de ω entre la dispersión a ángulos bajos (Θ^L) y a ángulos altos (Θ^H), $C(\omega) \equiv S_{NM}(\Theta^L, \omega)/S_{NM}(\Theta^H, \omega)$, donde el subíndice NM indica que se trata del material no magnético. En un material magnético, la dispersión a ángulos altos está dominada por la contribución de los fonones, por lo cual puede despreciarse la contribución magnética. Suponiendo que el mismo factor de escala $C(\omega)$ puede aplicarse al $\text{Yb}_2\text{Rh}_3\text{Ga}_9$, la contribución de fonones a ángulos bajos puede estimarse como [76, 75].

$$S_M^{fonon} = C(\omega) \times S_M(\Theta^H, \omega). \quad (2.119)$$

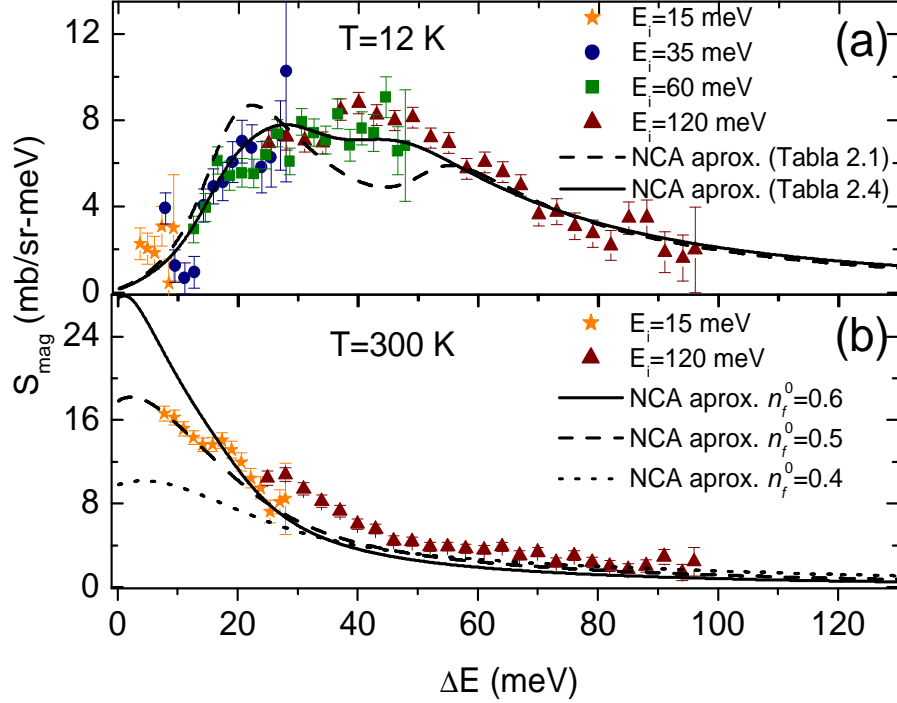


Figura 2.14: Resultados experimentales y de la teoría para la dispersión inelástica de neutrones para el compuesto $\text{Yb}_2\text{Rh}_3\text{Ga}_9$. (Ref. [75])

Los resultados teóricos a $T = 12$ K se muestran para dos conjuntos de parámetros en la Fig. 2.14 (a). La línea de trazos corresponde a los parámetros de la Tabla 2.1, mientras que la línea continua es un nuevo conjunto de parámetros (mostrado en la Tabla 2.4), en la que se buscaron los parámetros que se ajustaran *simultáneamente* experimentos de susceptibilidad estática (ver Fig. 2.15) y de dispersión de neutrones.

En la última curva teórica de $T = 12$ K, calculada con los parámetros de la Tabla 2.1, se pueden distinguir claramente dos máximos. El primero (≈ 20 meV) corresponde a $\simeq T_0$ y el otro (≈ 50 meV) corresponde al cuadruplete excitado, ubicado a $\Delta = 400$ K. A pesar de no reproducir cuantitativamente los datos experimentales y estar por fuera de las barras de error, este esquema de niveles es cualitativamente adecuado para explicar los datos de dispersión de neutrones. La falta de estructuras en los resultados experimentales indica que posiblemente el esquema de niveles inicial ha sido muy simplificado y que, para explicar simultáneamente la susceptibilidad magnética (Fig. 2.11) y dispersión de neutrones (Fig. 2.14), es necesario “romper” la degeneración supuesta inicialmente y utilizar más grados de libertad del modelo para lograr un acuerdo más cuantitativo, dando como resultado el ajuste de la Tabla 2.4 (mostrado en línea continua en la Fig. 2.14).

Cualitativamente, los datos experimentales a $T = 12$ K muestran un máximo alrededor de $\Delta E = 40$ meV. Experimentalmente, esto se conoce como *pico inelástico* de baja temperatura [56]. Al aumentar T (ver Fig. 2.14(b)), ese pico inelástico desaparece y aparece otro

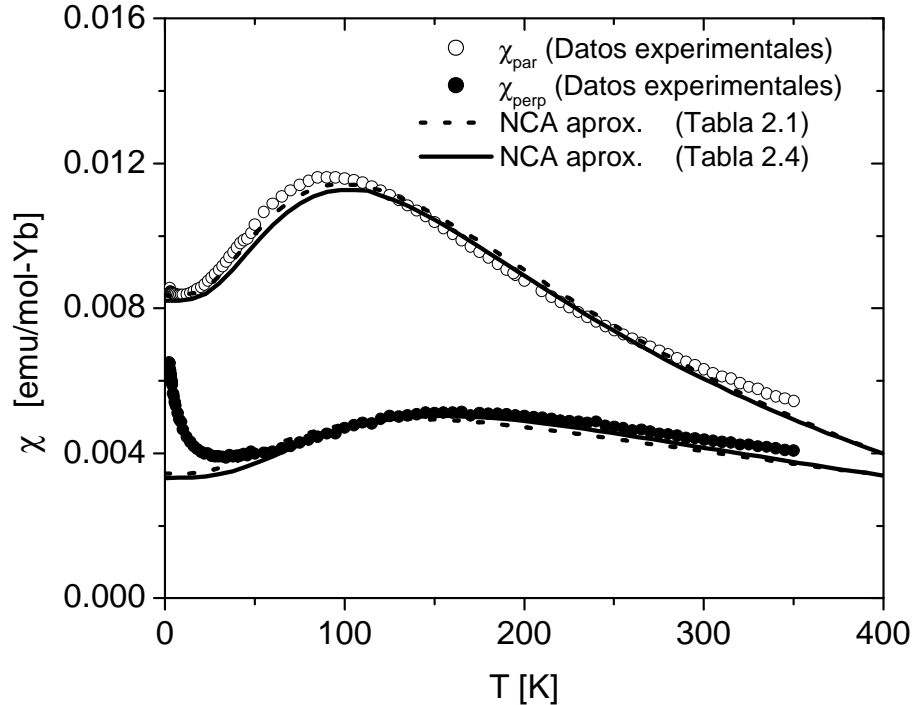


Figura 2.15: Susceptibilidad magnética del compuesto $\text{Yb}_2\text{Rh}_3\text{Ga}_9$. Los círculos son los resultados experimentales de la Ref. [70]. En línea punteada se muestran los ajustes con los parámetros de la Tabla 2.1, y en línea continua los de la Tabla 2.4.

centrado en $\Delta E = 0$, conocido como *pico cuasielástico*. Esta notable variación en el comportamiento del magnetismo es una característica de los compuestos de valencia intermedia [56]. Esto puede entenderse si se piensa que a temperaturas bajas ($T < T_0$), la física del sistema está determinada por el estado fundamental, el singlete de Kondo, lo que provoca una respuesta magnética nula pues el momento magnético efectivo es cero. A medida que la energía transferida aumenta y se hace comparable a T_0 , es posible comenzar a “ver” los momentos magnéticos del sistema ya que la excitación producida por los neutrones permite excitar estados de mayor energía en los que el momento magnético no está apantallado. Al aumentar todavía más la energía transferida ΔE , la dispersión comienza a disminuir por el hecho de que no hay grados de libertad magnéticos para excitar a esa energía. El hecho de que los niveles magnéticos estén ensanchados por la hibridización con la banda de conducción hace que la curva de $S(\Theta, \Delta E)$ varíe suavemente con ΔE .

Cuando $T > T_0$, la física del sistema es esencialmente la de una impureza libre, con sus niveles magnéticos ensanchados. En estas condiciones es suficiente transferir poca energía (o nula) para producir una respuesta magnética en el material, a diferencia del caso $T < T_0$.

Desde el punto de vista del modelo teórico, la susceptibilidad dinámica (Ec. (2.45)) es una convolución de las densidades $\rho_m(\epsilon)$, que a bajas temperaturas se maximiza cuando $\omega \simeq T_0$, ya que en ese punto las transiciones entre las componentes de los estados $|m\rangle$ del

Parámetro	Valor
$\Gamma_{\pm 1/2}^0 = \Gamma_{\pm 3/2}^0$	190 K
$\Gamma_{\pm 5/2}^0 = \Gamma_{\pm 7/2}^0$	180 K
$\Delta_{\pm 1/2}$	340 K
$\Delta_{\pm 3/2}$	280 K
$\Delta_{\pm 5/2}$	100 K
$\Delta_{\pm 7/2}$	0 K
n_f^0	0.60
I	20 mol/emu

Tabla 2.4: Parámetros de ajuste del modelo para el compuesto $\text{Yb}_2\text{Rh}_3\text{Ga}_9$ (líneas continuas en las Figs. 2.14 y 2.15).

fundamental y los estados $|m'\rangle$ de los estados excitados es máxima. A temperaturas mayores que T_0 , y basándonos en las soluciones aproximadas de la Sec. 2.4.2, las renormalizaciones introducidas por ρ_0 en la forma funcional de las ρ_m no son importantes y la convolución de la Ec.(2.45) se aproxima a la de dos curvas lorentzianas: esto explica por qué tienen el máximo en $\Delta E = 0$. Vemos que las soluciones aproximadas de la NCA tienen los ingredientes básicos necesarios para explicar el experimento. Sin embargo, notamos que el conjunto de parámetros que explica muy bien los datos experimentales a $T = 12$ K, es inadecuado para explicar los mismos a $T = 300$ K, como se puede ver en el rango $\Delta E < 10$ meV de la Fig. 2.14(b). En cambio, se observa que un valor menor de la valencia ($n_f^0 = 0.5$) ajusta mejor la curva que el valor $n_f^0 = 0.6$ dado en la Tabla 2.4. Esta discrepancia a alta temperatura se discute a continuación.

2.5.3 Valencia $n_f(T)$ vs T en $\text{Yb}_2\text{X}_3\text{Ga}_9$ ($\text{X}=\text{Rh},\text{Ir}$)

Mediante experimentos de absorción de rayos X se puede tener una medida del número de huecos en el nivel $4f$ de la impureza en función de T . Resultados experimentales de $n_f(T)$ en función de T se muestran en la Fig. 2.16 para los compuestos $\text{Yb}_2\text{X}_3\text{Ga}_9$ ($\text{X}=\text{Rh},\text{Ir}$) [75]. El error sistemático en los datos es independiente de la temperatura y del orden de 10% [75]. También se muestran en la misma figura resultados teóricos para $\text{Yb}_2\text{Rh}_3\text{Ga}_9$, obtenidos con la Ec. (2.106), utilizando los valores $n_f^0 = 0.6$ (línea continua) y $n_f^0 = 0.53$ (línea de trazos). Para el resto de los parámetros se utilizaron los valores de la Tabla 2.1.

Como se observa en la Fig. 2.16, la aproximación de la NCA sobreestima el valor de la valencia del nivel f en función de la temperatura. Esto podría deberse a los efectos de la red periódica, que están ausentes en cualquier aproximación de impureza. Diversos resultados sugieren que el “*crossover*” desde el comportamiento de líquido de Fermi local a bajas temperaturas al régimen de momento local a altas temperaturas sería más lento en la red de Anderson que en la impureza de Anderson. En general, ambos modelos predicen un aumento de $n_f(T)$ en función de T , ya que esto produce un aumento de entropía. Sin embargo en el caso de la red de Anderson, la concentración finita de átomos de Yb genera una transferencia de carga macroscópica desde los iones Yb en la configuración $4f^{14-n_f}$, hacia

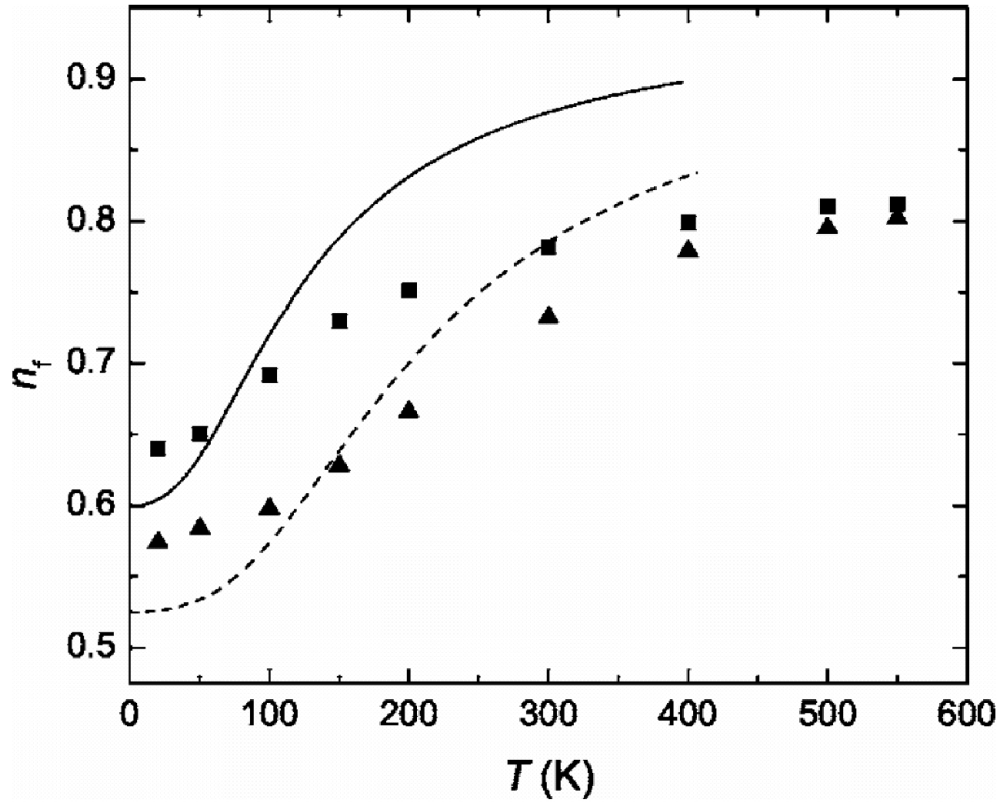


Figura 2.16: Resultados experimentales de mediciones de la valencia del orbital $4f$ de los compuestos $\text{Yb}_2\text{Rh}_3\text{Ga}_9$ (cuadrados) y $\text{Yb}_2\text{Ir}_3\text{Ga}_9$ (triángulos)(Ref. [75]). Se muestran también los resultados de la teoría para $n_f^0 = 0.6$ (línea continua) y $n_f^0 = 0.53$ (línea de trazos). El resto de los parámetros corresponden a los de la Tabla 2.1.

la banda de conducción, con lo cual el potencial químico debe ajustarse en función de la temperatura. Es decir, la banda de conducción debe acomodar una cantidad de electrones n_f por cada átomo de Yb, a costa de aumentar la energía cinética del sistema. Para minimizar ese aumento de energía, se produce un incremento más moderado de la ocupación del orbital f en función de T . Todos estos efectos están ausentes en el caso de impurezas diluidas, ya que la banda de conducción permite acomodar la carga infinitesimal que transfieren los iones Yb sin modificar su potencial químico apreciablemente. Este efecto ha sido ya observado en otros compuestos [73] y ha sido predicho mediante cálculos de Montecarlo Cuántico [77]. Por esta razón, cualquier teoría de la red de Anderson debe introducir otra escala de energía, la *energía de transferencia de carga*. Cualitativamente podemos ver cómo estos efectos en la valencia influyen en otros experimentos. En la Fig. 2.16 se observa que el valor de $n_f^0 = 0.53$ reproduce mejor el resultado experimental a $T = 300$ K que el valor $n_f^0 = 0.6$. Esto también se observa en la Fig. 2.14, donde la línea de trazos ($n_f^0 = 0.5$) reproduce mejor los datos experimentales de dispersión de neutrones.

2.5.4 Constante $\gamma = C/T$

Para finalizar las comparaciones con resultados experimentales se exponen los valores obtenidos para la constante γ , calculados mediante la Ec. (2.97). Para el compuesto $\text{Yb}_2\text{Ir}_3\text{Ga}_9$, el valor experimental de γ es 25 mJ/mol Yb K^2 , mientras que para $\text{Yb}_2\text{Rh}_3\text{Ga}_9$ es de 45 mJ/mol Yb K^2 , lo que indica una moderada renormalización de la masa. Los valores teóricos obtenidos con los parámetros de las Tablas 2.2 y 2.1 son respectivamente 25 mJ/mol Yb K^2 y 68 mJ/mol Yb K^2 , obteniéndose un acuerdo razonable.

2.6 Resumen y conclusiones

Se caracterizaron una serie de compuestos de Yb recientemente sintetizados utilizando el modelo de impureza de Anderson degenerado (con degeneración N), en una aproximación al desarrollo autoconsistente para N grande, conocido como NCA (“*Non Crossing Approximation*”). El método utilizado se basa en una solución variacional que es exacta a $T = 0$ en el límite $N \rightarrow \infty$. Tomando la solución variacional, se utilizan estos resultados para aproximar las ecuaciones de la NCA a $T > 0$. Este método está especialmente diseñado para describir aleaciones magnéticas diluidas con fuertes efectos de campo cristalino, y tiene la ventaja de evitar la autoconsistencia inherente a la NCA, aunque ello limita su aplicabilidad a energías y temperaturas no mayores que T_0 .

Los resultados obtenidos en esta parte de la tesis apoyan la hipótesis experimental sobre la existencia de valencia $4f$ intermedia en los compuestos en cuestión y simultáneamente, efectos importantes del campo cristalino, algo que es inusual como ya se mencionó anteriormente.

En el caso de la serie $\text{Yb}_2\text{M}_3\text{Ga}_9$, el valor obtenido para el número de huecos (valencia) en el orbital $4f$ a $T = 0$ es de $n_f^0 = 0.6$ para $\text{M}=\text{Rh}$ y de $n_f^0 = 0.53$ para $\text{M}=\text{Ir}$. En el caso del $\text{Yb}_3\text{Ni}_5\text{Al}_{19}$, se obtuvo $n_f^0 = 0.45$. Estos valores son típicos de compuestos de valencia intermedia. Las temperaturas de Kondo obtenidas en todos los casos son mayores a 400 K y del orden de la Δ , la separación de niveles dada por el campo cristalino.

El acuerdo logrado entre el modelo teórico y los experimentos realizados en la descripción de propiedades termodinámicas y dinámicas en el rango $T_{coh} < T < T_K$ es muy bueno a pesar de tratarse de un modelo de impureza. Esto tiene su origen principalmente en que el estado fundamental tipo líquido de Fermi en el modelo de impureza de Anderson guarda similitudes con el estado fundamental esperado en un modelo periódico. No obstante, se mencionan algunas evidencias de los efectos de la red, como la necesidad de incorporar correlaciones antiferromagnéticas en el cálculo de la susceptibilidad (a través del parámetro I), y la existencia de discrepancias entre teoría y experimento en $n_f(T)$ y $S(\vec{q}, \omega)$ a alta temperatura (~ 300 K), que estarían relacionadas con una liberación macroscópica de carga hacia la banda de conducción, algo ausente en los modelos de impureza.

Estos hechos indican que una descripción de impureza aislada es sólo una aproximación para describir la física de la valencia intermedia, y que en última instancia, es necesario introducir efectos de la red en un modelo más general.

Los resultados de esta parte de la tesis se encuentran publicados en las Refs. [72], [75], [78] y [70].

Capítulo 3

Impurezas magnéticas en corrales cuánticos

3.1 Introducción

Como se mencionó en la introducción, el desarrollo de la microscopía de efecto túnel (STM) ha generado numerosos avances en el entendimiento de los electrones en sistemas de tamaño nanoscópico. Usando esta tecnología se pudo estudiar la estructura electrónica local cerca de una impureza magnética aislada de Co depositada sobre superficies limpias de Cu(100) y Cu(111), en condiciones de alto vacío y temperaturas de 6 K [7]. Los espectros obtenidos en función de la diferencia de potencial entre la punta del STM y la muestra (también llamado *voltaje de "bias"*) revelaron la presencia de curvas de Fano en la conductancia túnel que pudieron ser interpretadas en términos del modelo de Kondo. El átomo de Co actúa como una impureza magnética, aportando un nivel d localizado, mientras que los estados extendidos de electrones de la superficie y del bulk del Cu forman la banda de conducción, obteniéndose temperaturas de Kondo de $T_K = 88$ K para el sistema Co/Cu(100) y de $T_K = 54$ K para Co/Cu(111) [7].

Otra ventaja del STM es que además de ser un instrumento de medición, es una herramienta que permite construir estructuras de tamaño atómico. Utilizando la punta del STM para mover átomos individualmente se pudieron construir corrales cuánticos de diversas formas [79, 46], con un área típica de decenas de nm^2 sobre superficies limpias de un metal noble o Cu(111).

Estos metales tienen superficies de Fermi prácticamente esféricas, pero en las direcciones [111] y equivalentes se abren "gaps" para los estados de bulk [9]. Esto permite la presencia de estados tipo Shockley localizados en la superficie (111), desacoplados de los estados de bulk, formando un gas de electrones 2D. Los corrales creados sobre estas superficies permiten "encerrar" a los electrones del gas 2D y permiten poner en evidencia los efectos del confinamiento, dado que la longitud de onda de Fermi en, por ejemplo, los estados de la superficie (111) del Cu es de ≈ 30 Å, mientras que la separación entre los átomos que forman el corral es de típicamente ≈ 10 Å [79]. De esta manera, lejos del borde, los electrones no pueden "ver" la discretización atómica de las paredes del corral [79]. Debido a este confinamiento, los estados

electrónicos dentro del corral se discretizan. Sin embargo, dado que este confinamiento no es perfecto, los electrones tienen la posibilidad de “escapar” del corral elíptico, y los estados electrónicos adquieren una *vida media*. En el espectro de niveles, éstos no aparecen como funciones deltiformes, sino como curvas lorentzianas con un cierto ancho. Una serie de trabajos teóricos han hecho énfasis en describir los aspectos cuánticos del confinamiento, aunque tratan la física de muchos cuerpos de manera fenomenológica [80, 47, 81]. Al incorporar en el corral una impureza magnética dentro del corral, se combinan los efectos de las correlaciones locales en el sitio de la impureza con los efectos del confinamiento.

En el experimento de Manoharan *et al.* [46] mencionado en la Introducción (Cap. 1), el corral está construido de tal forma que el nivel de Fermi de la superficie coincide con el estado número 42 (en orden creciente de energía) de un corral elíptico. Cuando la temperatura baja por debajo de T_K , los estados de conducción confinados dentro del corral apantallan el momento magnético de la impureza, lo que se observa en el espectro STM como una antiresonancia de Fano muy angosta cerca de la energía de Fermi, localizada en el sitio de la impureza [46]. La separación típica de niveles que se acoplan apreciablemente con la impureza es $\Delta > T_K$ por lo que, esencialmente sólo el estado 42 participa de este apantallamiento. Diversos estudios teóricos han mostrado que los efectos de vida media en los estados confinados dentro de un corral en el caso $\Delta > T_K$, y en general en sistemas donde la estructura electrónica de la banda de conducción depende fuertemente de la energía, son esenciales para el desarrollo de la resonancia de Kondo en E_F [82, 48, 83], razón por la cual es imprescindible un cálculo adecuado de la estructura electrónica del corral vacío.

Un asunto de interés actual en esta área es la importancia relativa de la hibridización de la impureza con los electrones del bulk y de la superficie ¹.

Cálculos *ab initio* confiables de la estructura electrónica, que incluyan dichos acoplamientos con la impureza en la superficie (111) de un metal noble, requieren superceldas demasiado grandes: deben contener más de 10 capas atómicas en el plano (111) para que se genere un estado Shockley superficial, y más de 100 átomos por capa para alcanzar el límite de una impureza diluida en la superficie [84]. Knorr *et al.* [7], basándose en el rápido decaimiento de $\Delta dI/dV$ cuando se aleja la punta del STM del sitio de la impureza, y con una teoría de jellium [85], concluyeron que los estados de bulk dominaban sobre los estados de superficie en la formación del singlete de Kondo. Esto lo confirman cálculos de *tight-binding* [84] y cálculos con Grupo de Renormalización Numérica de Wilson [86, 87]. Sin embargo, recientes cálculos teóricos realizados usando una aproximación de electrones casi libres e incluyendo los efectos de los gaps en las direcciones [111] y equivalentes [88], concluyeron que el efecto Kondo tenía que estar dominado por los estados de superficie. Merino y Gunnarson, en un cálculo de tipo *one-body* (sin correlaciones) [89], concluyeron que los estados superficiales deberían tener un rol importante en la formación del mencionado singlete. Esta falta de acuerdo pone en evidencia que este es aún un tema abierto.

Una posible alternativa para dilucidar este problema sería aprovechar la fuerte modulación espacial que presentan las funciones de onda electrónicas superficiales dentro de un corral cuántico, producto del confinamiento. La variación de dI/dV con la posición de una impureza

¹Los estados electrónicos del bulk y de la superficie no están completamente desacoplados debido a que los átomos del corral y de la impureza los mezclan al actuar como centros de dispersión [79].

dentro de un corral podría mostrar el peso relativo de las funciones de onda superficiales debido a que una mayor sensibilidad al cambio de posición indicaría una mayor presencia de estados de superficie en el singlete de Kondo. Esta posibilidad ha sido estudiada teóricamente con anterioridad mediante la utilización del Grupo de Renormalización Numérico [86]. Sin embargo, en este trabajo los efectos del confinamiento cuántico del corral se introducen fenomenológicamente como una modulación de la densidad de estados de conducción.

En la Sección 3.2 se expone el método utilizado en esta parte del trabajo para tratar el problema de muchos cuerpos, conocido como *método de bosones esclavos*. En la Sección 3.3 se presenta el modelo y aproximaciones utilizados para representar a una impureza interactuando con los electrones en una superficie nanoestructurada. En la Sección 3.4 se muestra la derivación de una fórmula para estimar la conductancia túnel en un experimento de STM y su conexión con la estructura electrónica del sistema estudiado. Los resultados de la conductancia túnel se muestran en la Sección 3.5 y finalmente las conclusiones de esta parte se exponen en la Sección 3.6.

3.2 El método de bosones esclavos

Este método se clasifica dentro de los *métodos de N grande*, como es el caso de la NCA que discutimos en el capítulo anterior. En el límite $U \rightarrow \infty$ del hamiltoniano de Anderson, la doble ocupación del orbital localizado está energéticamente prohibida (ver Sec. 2.2). Habíamos mostrado que introduciendo una representación en términos de las pseudo partículas \tilde{f}_m^\dagger (de carácter fermiónico) y e^\dagger (de carácter bosónico), los operadores de creación y aniquilación en el orbital localizado f podían escribirse como $f_m^\dagger \rightarrow \tilde{f}_m^\dagger e$ y $f_m \rightarrow e^\dagger \tilde{f}_m$ (Ec. (2.8)). Cambiando la notación a $f_m^\dagger \rightarrow d_m^\dagger$, $\tilde{f}_m^\dagger \rightarrow f_m^\dagger$, el vínculo de la Ec.(2.7) se escribe ahora como

$$\sum_m f_m^\dagger f_m + e^\dagger e = 1, \quad (3.1)$$

y el hamiltoniano de la Ec. (2.11) puede escribirse como

$$H = H_{band} + H_f + H_{mix}, \quad (3.2)$$

$$H_{band} = \sum_{k,m} \epsilon_k n_{k,m}, \quad (3.3)$$

$$H_f = \epsilon_{f,m} \sum_m f_m^\dagger f_m, \quad (3.4)$$

$$H_{mix} = \sum_{k,m} V_{k,m} \left(c_{k,m}^\dagger e^\dagger f_m + \text{H.c.} \right). \quad (3.5)$$

Como ya mencionamos en el capítulo anterior, hay varias formas de hacer efectivo el vínculo. En el formalismo de bosones esclavos para el hamiltoniano de Anderson con $U \rightarrow \infty$, se utiliza una proyección sobre los subespacios de interés empleando integrales funcionales e introduciendo el vínculo con un multiplicador de Lagrange λ [33, 34, 35, 36]. Utilizando el operador de número de pseudopartículas (Ec. (2.9)) $Q = \sum_m f_m^\dagger f_m + e^\dagger e$, el vínculo se

impone sumando el término $\lambda(Q - 1)$ al hamiltoniano de la Ec. (3.2)

$$H'(\lambda) = H + \lambda(Q - 1). \quad (3.6)$$

Notando que el operador Q verifica $[Q, H] = 0$ (el hamiltoniano conserva el número de pseudopartículas), la función de partición del sistema puede escribirse como

$$Z_G(\lambda) = \text{Tr} \left[e^{-\beta(H + \lambda Q)} \right] = \sum_{Q=0}^{\infty} Z(Q) e^{-\beta\lambda Q}. \quad (3.7)$$

Para proyectar sobre el subespacio físicamente relevante $Q_0 = 1$ hacemos

$$Z(Q_0) = \frac{\beta}{2\pi i} \int_0^{2\pi i/\beta} d\lambda Z_G(\lambda) e^{\beta\lambda Q_0}, \quad (3.8)$$

donde se ha utilizado la representación de la delta de Kronecker [56]

$$\delta_{n,0} = \frac{1}{2\pi i} \int_0^{2\pi i} dx e^{xn}. \quad (3.9)$$

De esta manera, es posible utilizar los métodos tradicionales de teorías de campos para partículas bosónicas o fermiónicas para evaluar $Z_G(\lambda)$ y posteriormente proyectar sobre el subespacio de interés.

Para evaluar la función $Z_G(\lambda)$ vamos a emplear el formalismo de integrales funcionales sobre los campos bosónicos y fermiónicos. Una buena referencia sobre este método se halla en los libros de Negele y Orland [62] y de Kleinert [63]. La función $Z_G(\lambda)$ puede escribirse como [62, 63]

$$Z_G(\lambda) = \int \mathcal{D}[\bar{\psi}, \psi] \mathcal{D}[\bar{e}, e] e^{-\beta F[\bar{\psi}, \psi; \bar{e}, e]}, \quad (3.10)$$

donde

$$\beta F[\bar{\psi}, \psi; \bar{e}, e] = \int_0^\beta d\tau \left[\sum_i \bar{\psi}_i \frac{\partial}{\partial \tau} \psi + \bar{e} \frac{\partial}{\partial \tau} e + H'(\lambda) \right], \quad (3.11)$$

es la funcional de la energía libre total del sistema a una temperatura $T = 1/k_B\beta$. Las variables de Grassman $\bar{\psi}_i(\tau)$ y $\psi_i(\tau)$ representan los campos fermiónicos y los números complejos $\bar{e}(\tau)$ y $e(\tau)$ representan los campos bosónicos. Para simplificar la notación, se omiten los argumentos en el tiempo imaginario τ de los campos en la integral funcional. La integral sobre $\int \mathcal{D}[\bar{\psi}, \psi] \mathcal{D}[\bar{e}, e]$ indica una integral de camino sobre todas las posibles funciones $\bar{\psi}(\tau)$, $\psi(\tau)$ y $\bar{e}(\tau)$, $e(\tau)$, siendo $\mathcal{D}[\dots]$ la medida usual para campos fermiónicos o bosónicos [62, 63]. Estos campos tienen las propiedades de simetría [62, 63, 61]

$$\begin{aligned} \psi(\tau + \beta) &= -\psi(\tau) \\ e(\tau + \beta) &= e(\tau). \end{aligned} \quad (3.12)$$

Esta representación de la función de partición es formalmente exacta, sin embargo sólo puede ser resuelta analíticamente para hamiltonianos bilineales en los campos (es decir, hamiltonianos tipo “one-body”). En ese caso, para evaluar la integral funcional podemos introducir la representación espectral

$$\begin{aligned}\psi(\tau) &= \frac{1}{\beta} \sum_n \psi_n \exp[-i\omega_n \tau], \\ e(\tau) &= \frac{1}{\beta} \sum_\nu e_\nu \exp[-i\omega_\nu \tau],\end{aligned}\tag{3.13}$$

en las Ecs. (3.10) y (3.11), donde $i\omega_n = 2\pi(n + 1/2)/\beta$ y $i\omega_\nu = 2\pi\nu/\beta$ (con n, ν números enteros) son las frecuencias de Matsubara fermiónicas y bosónicas respectivamente, y ψ_n y e_ν son variables de Grassman y bosónicas respectivamente. Dada la forma bilineal de $H'(\lambda)$, la integral funcional puede ser evaluada exactamente como una integral gaussiana [62, 63] que, a menos de una constante, es

$$Z_G(\lambda) \propto \exp \left[-\text{Tr} \ln \left(i\omega_\eta \mathbf{1} - \hat{\mathbf{H}}'(\lambda) \right) \right],\tag{3.14}$$

donde la traza debe ser entendida sobre el set completo de modos fermiónicos n y bosónicos ν , como así también sobre los elementos de la base en la que se escriben las matrices $i\omega_\eta \mathbf{1}$ y $\hat{\mathbf{H}}'(\lambda)$, donde $\eta = n, \nu$. Definiendo la matriz del propagador de una partícula

$$\hat{\mathbf{G}} \equiv \left[i\omega_\eta \mathbf{1} - \hat{\mathbf{H}}'(\lambda) \right]^{-1},\tag{3.15}$$

y usando la Ec. (3.11) podemos escribir la energía libre del sistema como

$$F = -\frac{1}{\beta} \text{Tr} \ln \hat{\mathbf{G}}.\tag{3.16}$$

La suma de Matsubara puede evaluarse como una integral por residuos sobre el plano complejo, como se indica en la Fig. 3.1 [62, 61]. Puede finalmente expresarse esta suma como [62, 63, 61]

$$F = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \text{Tr} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega n_\eta(\omega) \ln \hat{\mathbf{G}},\tag{3.17}$$

donde $n_\eta(\omega)$ es la función de Bose $n_B(\omega)$ o de Fermi $n_F(\omega)$ según se trate de bosones o fermiones, respectivamente. Para poner un ejemplo simple, supongamos un caso fermiónico en el que la matriz $\mathbf{H}'(\lambda)$ esté escrita en una base en la que es diagonal. En ese caso, utilizando la identidad operatorial $\text{Tr} \ln \mathbf{A} = \ln \det \mathbf{A}$ [56], la energía libre se evalúa como

$$F = \frac{1}{\pi} \text{Im} \sum_\alpha \int_{-\infty}^{\infty} d\omega n_F(\omega) \ln (\omega + i0^+ - \epsilon_\alpha),\tag{3.18}$$

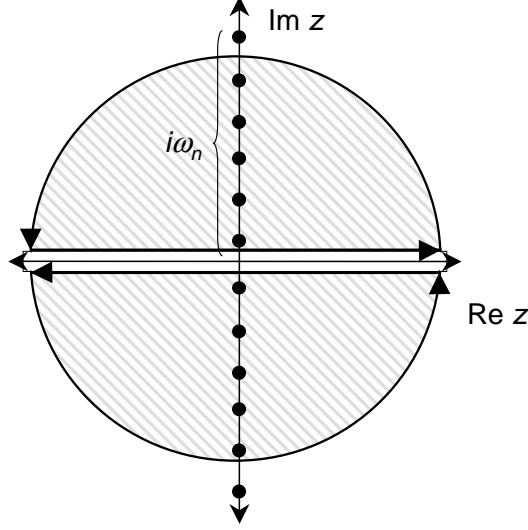


Figura 3.1: Evaluación de la suma de Matsubara mediante una integral en el plano complejo, para el caso fermiónico.

donde ϵ_α son los autovalores de $\mathbf{H}'(\lambda)$. Integrando por partes, y despreciando los términos de borde, se obtiene

$$\begin{aligned} F &= \frac{1}{\pi} \text{Im} \sum_{\alpha} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \left[\frac{1}{\beta} \ln(1 + e^{-\beta\omega}) \right] \frac{1}{\omega - \epsilon_\alpha + i0^+}, \\ &= -\frac{1}{\beta} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \ln(1 + e^{-\beta\omega}) \rho(\omega), \end{aligned} \quad (3.19)$$

donde en la última línea se utilizó la identidad $\frac{1}{x+i0^\pm} = \text{P}\left(\frac{1}{x}\right) \mp i\pi\delta(x)$ y la definición usual de la densidad de estados $\rho(\omega) = \sum_{\alpha} \delta(\omega - \epsilon_\alpha)$. Esta expresión es la misma que aparece en la Ec. 7.93 de la Ref. [56].

3.2.1 La aproximación “saddle-point” o de punto de ensilladura

Si el hamiltoniano posee N grados de libertad, y éste crece extensivamente con N , puede definirse un hamiltoniano “intensivo” $h = H/N$ en el límite $N \rightarrow \infty$. Cuando lo reemplazamos en la expresión de Z_G de la Ec.(3.10)

$$Z_G(\lambda) = \int \mathcal{D}[\bar{\psi}, \psi] \mathcal{D}[\bar{e}, e] e^{-\beta N f[\bar{\psi}, \psi; \bar{e}, e]}, \quad (3.20)$$

donde $f = F/N$, vemos que el exponente en la exponencial crece extensivamente con N . Está claro de la fórmula de la Ec.(3.20) que aquellos campos que minimizan el valor de f son los más probables. Al tomar el límite $N \rightarrow \infty$, las fluctuaciones del sistema alrededor de estos valores son cada vez menores, y los campos van perdiendo su dinámica natural, adquiriendo un valor constante. Esto constituye una derivación formal para las aproximaciones de campo medio,

en las que usualmente se “condensan” algunos grados de libertad bosónicos directamente en el hamiltoniano ², eliminando *a priori* su dinámica. Para el caso del hamiltoniano de Anderson con U finito, la aproximación de campo medio en los operadores $n_{d,\sigma} = d_{\sigma}^{\dagger}d_{\sigma} \rightarrow \langle n_{d,\sigma} \rangle$ se obtiene con el uso adicional de una transformación de Hubbard-Stratonovich [62, 90].

La aproximación de punto de ensilladura es formalmente equivalente a la aproximación de campo medio, aunque su derivación a través de integrales funcionales es más general puesto que proporciona un marco formal a partir del cual incluir correcciones sistemáticas debidas a fluctuaciones alrededor de las configuraciones del campo medio.

3.2.2 La aproximación de punto de ensilladura en el problema de la impureza de Anderson con $U \rightarrow \infty$

Para obtener los valores del campo e que minimizan la energía libre F , se estudia el movimiento de los fermiones en una determinada configuración estática del campo bosónico. La integral funcional puede escribirse convenientemente en la forma

$$Z_G(\lambda) = \int \mathcal{D}[\bar{e}, e] e^{-\beta F_{eff}[\bar{e}, e]}, \quad (3.21)$$

donde

$$e^{-\beta F_{eff}[\bar{e}, e]} = \int \mathcal{D}[\bar{\psi}, \psi] e^{-\beta F[\bar{\psi}, \psi; \bar{e}, e]}, \quad (3.22)$$

donde $F_{eff}[\bar{e}, e]$ es la energía libre *efectiva* habiendo integrado primero los grados de libertad fermiónicos en una cierta configuración estática del campo bosónico e .

Como mencionamos anteriormente, la aproximación de punto de ensilladura tiene sentido cuando se toma un límite $N \rightarrow \infty$. En el hamiltoniano de Anderson de la Ec.(3.2) el número de grados de libertad bosónicos es solamente uno, con lo que claramente no correspondería hacer este tipo de aproximación. Sin embargo, Anderson [57] propuso usar la degeneración magnética del orbital localizado para proporcionar un parámetro extensivo con el cual hacer aproximaciones sistemáticas. En el caso de las tierras raras, cuando los efectos del campo cristalino son despreciables, se tiene que $N = 14$, lo cual constituye una muy buena aproximación ³. Sin embargo, incluso en el caso $S = 1/2$ ($N = 2$), la aproximación de punto de ensilladura da resultados que son cualitativamente comparables con los resultados exactos y, como veremos más adelante, contiene los principales ingredientes para describir el efecto Kondo.

Para obtener los mínimos de la energía libre F formalmente se debe derivar el argumento de la función de partición completa (Ec. (3.8))

$$Z(Q_0) = \frac{\beta}{2\pi i} \int_0^{2\pi i/\beta} d\lambda \times \int \mathcal{D}[\bar{e}, e] e^{-\beta(F_{eff}[\bar{e}, e] - \lambda Q_0)}, \quad (3.23)$$

²Las variables de Grassman no pueden ser condensadas

³En lo sucesivo, como en el capítulo anterior, N denota la degeneración magnética del orbital localizado.

es decir, redefiniendo $F_{eff} \rightarrow F_{eff} - \lambda Q_0$, las ecuaciones del “*saddle-point*” son

$$\frac{\delta F_{eff}}{\delta \bar{e}(\tau)} = 0, \quad (3.24)$$

$$\frac{\partial F_{eff}}{\partial \lambda} = 0. \quad (3.25)$$

Nótese que la primera de estas ecuaciones es una derivada funcional. Algo equivalente es introducir primero la representación espectral (Ec. (3.13)), y luego realizar derivadas comunes con respecto a las variables \bar{e}_ν . Dado que supondremos que el campo bosónico no tiene dinámica $e(\tau) \equiv e$, sólo será no nulo el elemento $\nu = 0$ en la representación espectral de la Ec. (3.13). La integral funcional en la Ec.(3.22) puede resolverse exactamente, ya que se trata de un problema efectivo bilineal. La matriz del operador $\hat{\mathbf{G}}^{-1}$ (Ec. (3.15)), para un modo fermiónico de Matsubara $i\omega_n$ y para la proyección m del momento angular en la dirección z , puede escribirse en forma matricial como

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{G}}_m^{-1}(i\omega_n) &= i\omega_n \mathbf{1} - \hat{\mathbf{H}}'_m(\lambda) \\ &= \left[\begin{array}{c|cccc} (i\omega_n - \epsilon_{f,m} - \lambda) & \bar{e}_0 \bar{V}_{k=k_1} & \bar{e}_0 \bar{V}_{k=k_2} & \bar{e}_0 \bar{V}_{k=k_3} & \dots \\ \hline e_0 V_{k=k_1} & (i\omega_n - \epsilon_{k=k_1}) & 0 & 0 & \dots \\ e_0 V_{k=k_2} & 0 & (i\omega_n - \epsilon_{k=k_2}) & 0 & \dots \\ e_0 V_{k=k_3} & 0 & 0 & (i\omega_n - \epsilon_{k=k_3}) & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{array} \right], \end{aligned}$$

donde se ha elegido la base de tal manera que el primer elemento denota el fermión f_m , y el resto de los elementos están formados por los electrones de la banda de conducción (dado que hemos utilizado una base diagonal para los electrones de conducción, ésta diagonaliza la matriz inferior). En lugar de encontrar las combinaciones lineales de campos que diagonalizan la matriz del hamiltoniano $\hat{\mathbf{H}}'_m(\lambda)$, vamos a utilizar la identidad [36]

$$\text{Tr} \ln \begin{bmatrix} A & C \\ C^\dagger & B \end{bmatrix} = \text{Tr} \ln B + \text{Tr} \ln (A - C^\dagger B^{-1} C). \quad (3.26)$$

De esta manera, podemos separar las contribuciones a F_{eff} en una parte que viene del electrón f y otra que viene de los electrones de conducción. Definiendo las funciones de Green no interactuantes

$$G_{ff,m}^0(i\omega_n) \equiv (i\omega_n - \epsilon_{f,m} - \lambda)^{-1}, \quad (3.27)$$

$$G_{kk,m}^0(i\omega_n) \equiv (i\omega_n - \epsilon_k)^{-1}, \quad (3.28)$$

y la función de Green de los electrones f acoplados con la banda de conducción

$$[G_{ff,m}(i\omega_n)]^{-1} = [G_{ff,m}^0(i\omega_n)]^{-1} - \sum_k \frac{|e_0 V_k|^2}{i\omega_n - \epsilon_k}, \quad (3.29)$$

$$= i\omega_n - \epsilon_{f,m} - \lambda - \sum_k \frac{|e_0 V_k|^2}{i\omega_n - \epsilon_k} \quad (3.30)$$

De esta manera, usando estas expresiones y la identidad de la Ec.(3.26) en la Ec.(3.16) obtenemos $F_{eff} = F_{boson} + F_{fermion}$, donde $F_{boson} = (e_0^2 - 1)\lambda$, y

$$\begin{aligned} F_{fermion} &= -\frac{1}{\beta} \sum_m \text{Tr} \ln \hat{\mathbf{G}}_m \\ &= -\frac{1}{\beta} \sum_m \text{Tr} \ln \hat{\mathbf{G}}_{band,m}^0 - \frac{1}{\beta} \sum_m \text{Tr} \ln G_{ff,m}. \end{aligned} \quad (3.31)$$

Identificando la contribución a la energía libre total que proviene de los electrones de conducción desacoplados del nivel localizado f como $F_0 = -\frac{1}{\beta} \sum_m \text{Tr} \ln \hat{\mathbf{G}}_{band,m}^0$, podemos definir la parte de la energía libre que surge del acoplamiento con la impureza como

$$\begin{aligned} \Delta F_{eff} &= F_{eff} - F_0, \\ &= (e_0^2 - 1)\lambda - \frac{1}{\beta} \sum_m \sum_n \ln G_{ff,m}(i\omega_n). \end{aligned} \quad (3.32)$$

De esta manera, las Ecs. (3.24) y (3.25) pueden expresarse como

$$0 = \frac{\partial \Delta F_{eff}}{\partial e_0} = \lambda + \frac{1}{\beta} \sum_m \sum_n G_{ff,m}(i\omega_n) \sum_k |V_k|^2 G_{kk,m}^0(i\omega_n), \quad (3.33)$$

$$0 = \frac{\partial \Delta F_{eff}}{\partial \lambda} = e_0^2 + \frac{1}{\beta} \sum_m \sum_n G_{ff,m}(i\omega_n) - 1. \quad (3.34)$$

Las sumas de Matsubara se pueden evaluar mediante integrales en el plano complejo (ver Fig. 3.1), y se obtiene

$$0 = \lambda - \frac{1}{\pi} \sum_m \text{Im} \left[\int_{-\infty}^{\infty} d\omega G_{ff,m}(\omega + i0^+) \sum_k |V_k|^2 G_{kk,m}^0(\omega + i0^+) \right], \quad (3.35)$$

$$0 = e_0^2 - \frac{1}{\pi} \sum_m \text{Im} \left[\int_{-\infty}^{\infty} d\omega \sum_n G_{ff,m}(\omega + i0^+) \right] - 1. \quad (3.36)$$

Se obtiene el mismo resultado condensando directamente el campo bosónico en el hamiltoniano $H'(\lambda)$ de la Ec. (3.6) en una descripción tipo campo medio usual, y minimizando la energía libre del hamiltoniano fermiónico bilineal efectivo $H_{eff} = H_{eff}(\lambda, e_0)$ que se obtiene con este procedimiento respecto de las variables λ, e_0 . Si estamos a $T = 0$, se puede usar el teorema de Hellman-Feynman [91, 92] para simplificar el cálculo y la obtención de las ecuaciones del punto de ensilladura. Partiendo de la expresión de la energía del estado fundamental $E_g = \langle \Psi_g | H_{eff} | \Psi_g \rangle$, se obtiene

$$\begin{aligned} \frac{\partial E_g}{\partial e_0} &= \frac{\partial}{\partial e_0} [\langle \Psi_g | H_{eff} | \Psi_g \rangle] = \left\langle \Psi_g \left| \frac{\partial H_{eff}}{\partial e_0} \right| \Psi_g \right\rangle = 0, \\ \frac{\partial E_g}{\partial \lambda} &= \frac{\partial}{\partial \lambda} [\langle \Psi_g | H_{eff} | \Psi_g \rangle] = \left\langle \Psi_g \left| \frac{\partial H_{eff}}{\partial \lambda} \right| \Psi_g \right\rangle = 0, \end{aligned} \quad (3.37)$$

donde los valores medios en el estado fundamental del sistema completo pueden obtenerse mediante ecuaciones de movimiento [93].

De la Ec. (B.8) del Apéndice B.1, puede verse que en un caso isotrópico, en el límite de Kondo $e_0 \rightarrow 0$ (ocupación $\langle n_f \rangle \rightarrow 1$), implica $\lambda \rightarrow \epsilon_f$ y reemplazando esto en la Ec. (B.7) se puede aproximar $\tilde{\Gamma} = e_0^2 \Gamma$, con $\Gamma = \pi V^2 \rho_c$, como

$$\tilde{\Gamma} = D \exp^{-\frac{\pi |\epsilon_f|}{\Gamma N}}, \quad (3.38)$$

que es exactamente la misma expresión para T_K que se obtuvo en la Ec. (2.54) en el contexto del método variacional. Esta es esencialmente la derivación del campo medio aplicado al modelo de Anderson de Newns y Read [34, 56]. La fenomenología obtenida con este método corresponde a la física del efecto Kondo.

3.2.3 Interpretación física de la aproximación de punto de ensilladura

La aproximación de punto de ensilladura da como resultado un problema efectivo de electrones no correlacionados. La expresión del propagador de una partícula para el electrón d con $S = 1/2$ es

$$\begin{aligned} G_{dd,\sigma}(\tau) &= \langle T_\tau d_\sigma(\tau) d_\sigma^\dagger(0) \rangle, \\ &= \langle T_\tau e^\dagger(\tau) f_\sigma(\tau) f_\sigma^\dagger(0) e(0) \rangle \end{aligned} \quad (3.39)$$

donde T es el operador de ordenamiento temporal en el tiempo imaginario τ . En la aproximación de punto de ensilladura

$$G_{dd,\sigma}(\tau) \rightarrow e_0^2 \langle T_\tau f_\sigma(\tau) f_\sigma^\dagger(0) \rangle, \quad (3.40)$$

lo que permite interpretar al factor e_0^2 como el peso de cuasipartícula Z en una teoría de líquido de Fermi donde las cuasipartículas son las excitaciones fermiónicas dadas por $G_{ff,\sigma}$. Esto es consistente con la descripción del problema de Kondo en términos de cuasipartículas no interactuantes a $T \rightarrow 0$ dada por Nozières [24]. El campo bosónico condensado e_0^2 describe los movimientos electrónicos colectivos en el líquido de Fermi. Desde este punto de vista, la resonancia en $\omega = \epsilon_d + \lambda$ que aparece en la densidad espectral $\rho_f(\omega) = -\text{Im}G_{ff,m}(\omega + i0^+)/\pi$ en la Ec. (3.30) es la resonancia de Kondo en el nivel de Fermi, cuyo peso integrado es el peso de cuasipartícula Z .

La desventaja de esta aproximación es que sólo describe el pico de Kondo y se pierden los detalles de los picos de carga.

Como se argumentó en la Sec. 3.2.1, el campo medio es exacto en el límite de degeneración infinita $N \rightarrow \infty$. Las teorías de campo medio se caracterizan por la ruptura de simetrías. En este caso, la simetría que se rompe es una simetría de *gauge*: el hamiltoniano es invariante ante la operación de simetría

$$\begin{aligned} e &\rightarrow e \exp[i\theta], \\ f &\rightarrow f \exp[i\theta], \end{aligned} \quad (3.41)$$

en los operadores. El rompimiento espontáneo de simetría es posible para $N \rightarrow \infty$, pero no para N finito. El teorema de Elitzur [94] predice que ninguna simetría de gauge local puede ser rota. Sin embargo, la solución de campo medio rompe esta simetría, dando valores no nulos para los valores medios $\langle e^\dagger \rangle = \langle e \rangle = e_0$. Dado que la simetría de gauge es una simetría continua, al romperse esta simetría aparece un modo de energía cero, que se conoce como *modo de Goldstone* [62, 90]. Newns y Read [34] calcularon las correcciones debidas a las fluctuaciones alrededor de la solución de campo medio y obtuvieron como resultado una divergencia de éstas. Posteriormente, demostraron que eran las fluctuaciones de la fase $e^{i\theta}$ las que divergían debido a la falta de restricciones en su dinámica. Cuando se tienen en cuenta, destruyen la fase con simetría rota. Esto se interpreta como que la simetría local es restaurada por las fluctuaciones del modo de Goldstone. Utilizando una transformación de gauge adecuada en los campos, Newns y Read pudieron factorizar los términos divergentes provenientes de las fluctuaciones de la fase y pudieron calcular correcciones por fluctuaciones en el campo bosónico. Coleman [36] demostró que puede interpretarse a las aproximaciones en $1/N$ como aproximaciones en las que la simetría está “prácticamente rota”, es decir, partiendo de la solución de campo medio (que rompe la simetría), pueden incorporarse correcciones sistemáticas incluyendo fluctuaciones de la componente radial de orden $1/N$, tratando cuidadosamente las fluctuaciones de la fase. Con estas correcciones, el cálculo de la densidad espectral a orden $1/N$ muestra una nueva resonancia en ϵ_f , por debajo del nivel de Fermi, que se interpreta como el pico de transferencia de carga. De todas maneras, el peso de esta resonancia no es el correcto [36] a ese orden y la complejidad para incorporar correcciones de mayor orden no permiten ir mucho más lejos.

3.2.4 Formulación de Kotliar y Ruckenstein para U finito

Dentro de las muchas implementaciones posibles del método de partículas auxiliares, el método de bosones esclavos introducido por Kotliar y Ruckenstein [95] ha sido ampliamente utilizado para representar problemas en los que el parámetro U es finito. Esto permite estudiar problemas en los que la doble ocupación del estado d no es despreciable. Originalmente fue pensado para el modelo de Hubbard, pero su extensión al modelo de Anderson es trivial. En esta formulación, los estados a representar para el caso $S = 1/2$ son el estado vacío $|0\rangle$, los estados simplemente ocupados con un fermión con proyección σ : $d_\sigma^\dagger|0\rangle$ y un estado doble ocupado $d_\uparrow^\dagger d_\downarrow^\dagger|0\rangle$. Se define una extensión de la representación anterior

$$\begin{aligned} |0\rangle &\rightarrow e^\dagger|0\rangle, \\ d_\sigma^\dagger|0\rangle &\rightarrow g_\sigma^\dagger f_\sigma^\dagger|0\rangle, \\ d_\uparrow^\dagger d_\downarrow^\dagger|0\rangle &\rightarrow h^\dagger f_\uparrow^\dagger f_\downarrow^\dagger|0\rangle, \end{aligned} \quad (3.42)$$

donde los operadores están sujetos a los vínculos

$$e^\dagger e + \sum_\sigma g_\sigma^\dagger g_\sigma + h^\dagger h = 1, \quad (3.43)$$

$$d_\sigma^\dagger d_\sigma = g_\sigma^\dagger g_\sigma + h^\dagger h. \quad (3.44)$$

Al igual que antes, el operador de creación e^\dagger es bosónico y se asocia al estado vacío, y f_σ^\dagger es fermiónico. Para poder representar el estado doblemente ocupado es necesario aumentar el número de los operadores auxiliares: los nuevos operadores de creación g_σ^\dagger y h^\dagger verifican relaciones de conmutación bosónicas y se vinculan a los estados simplemente ocupados y al estado doblemente ocupado, respectivamente.

El hamiltoniano de Anderson para U finito puede escribirse en esta representación como [95]

$$\begin{aligned}
H &= H_c + H_d + H_{mix} \\
H_{bulk} &= \sum_{k,\sigma} \epsilon_k c_{k,\sigma}^\dagger c_{k,\sigma} \\
H_d &= \epsilon_d \sum_{\sigma} f_{\sigma}^\dagger f_{\sigma} + U h^\dagger h \\
H_{mix} &= \sum_{k,\sigma} V_k f_{\sigma}^\dagger \left(g_{\sigma}^\dagger e + h^\dagger g_{\bar{\sigma}} \right) c_{k,\sigma} + \text{H.c.}
\end{aligned} \tag{3.45}$$

Introduciendo los vínculos de las Ecs. (3.43) y (3.44) mediante los multiplicadores de Lagrange λ' y λ_σ respectivamente, puede evaluarse formalmente la función de partición Z mediante el formalismo de la integral funcional, como en el caso anterior. Con la aproximación de punto de ensilladura en la integral funcional, minimizando la energía libre F respecto de los parámetros λ_σ , λ , e_0 , $g_{\sigma,0}$ y h_0 , se han obtenido resultados que son comparables a la aproximación de Gutzwiller en el hamiltoniano de Hubbard [95].

Sin embargo, en el límite no interactuante $U \rightarrow 0$, la implementación del campo medio da resultados erróneos. Esto puede verse observando que todas las configuraciones posibles de la impureza (los 4 estados de la representación Ec.(3.42)) son igualmente probables en el caso en que hay simetría electrón-hueco y para $U \rightarrow 0$, dando un valor de $e_0^2 = g_{\sigma,0}^2 = h_0^2 = 1/4$ en la aproximación de campo medio. Estos valores numéricos pueden absorberse en un elemento de matriz de hopping efectivo $\tilde{V}_k = V_k/4$ en el hamiltoniano de Anderson de la Ec. (3.45), lo que conduce a un límite no interactuante erróneo.

Kotliar y Ruckenstein propusieron una forma de recuperar el límite no interactuante correcto, introduciendo los operadores [95]

$$A_\sigma = \frac{1}{\sqrt{(1 - e^\dagger e - s_\sigma^\dagger s_\sigma)}}, \tag{3.46}$$

$$B_\sigma = \frac{1}{\sqrt{(1 - s_\sigma^\dagger s_\sigma - h^\dagger h)}}, \tag{3.47}$$

3.3 Modelo para una impureza magnética en una superficie nanoestructurada 63

en el hamiltoniano de Anderson de la Ec. (3.45)

$$\begin{aligned}
H &= H_c + H_d + H_{mix} \\
H_{bulk} &= \sum_{k,\sigma} \epsilon_k c_{k,\sigma}^\dagger c_{k,\sigma} \\
H_d &= E_d \sum_{\sigma} f_{\sigma}^\dagger f_{\sigma} + U h^\dagger h \\
H_{mix} &= \sum_{k,\sigma} V_k f_{\sigma}^\dagger \left[A_{\sigma} (g_{\sigma}^\dagger e + h^\dagger g_{\bar{\sigma}}) B_{\sigma} \right] c_{k,\sigma} + \text{H.c.}
\end{aligned} \tag{3.48}$$

Esto no tiene consecuencias si los vínculos son tratados exactamente, pero en la aproximación de campo medio, permiten compensar el factor 1/4 en el elemento \tilde{V}_k .

Mientras que de esta manera se recupera el límite no interactuante, el límite $U \rightarrow \infty$ da resultados incorrectos al incorporar las raíces de Kotliar y Ruckenstein (ver Apéndice B.2). Es conveniente recordar esto al tratar este límite en las secciones siguientes.

3.3 Modelo para una impureza magnética en una superficie nanoestructurada

A continuación describimos el modelo utilizado para describir la estructura electrónica de un sistema formado por una impureza magnética (por ejemplo, un átomo de Co) en una superficie de Cu(111) en presencia o no de un corral cuántico.

Consideraremos sólo un nivel d localizado en el sitio de la impureza. Esta simplificación se basa en recientes estudios teóricos [88, 89, 96] que consideran al orbital $d_{3z^2-r^2}$ del átomo de Co más hibridizado con la superficie. Esto a su vez está confirmado con cálculos “*tight-binding*”, que además afirman que los electrones del bulk prefieren los estados d_{xz} y d_{yz} para acoplarse [84]. Una separación de los niveles d es de cualquier manera esperable, dado que la presencia de la superficie rompe la simetría de rotación continua (grupo $SO(3)$) en el sitio de la impureza.

El modelo utilizado en este trabajo es el hamiltoniano de Anderson para una impureza con $S = 1/2$, convenientemente generalizado

$$\begin{aligned}
H &= H_{sup} + H_{bulk} + H_d + H_{mix} \\
H_{sup} &= \sum_{j,\sigma} \epsilon_j^s s_{j,\sigma}^\dagger s_{j,\sigma} \\
H_{bulk} &= \sum_{j,\sigma} \epsilon_j^b b_{j,\sigma}^\dagger b_{j,\sigma} \\
H_d &= E_d \sum_{\sigma} d_{\sigma}^\dagger d_{\sigma} + U d_{\uparrow}^\dagger d_{\uparrow} d_{\downarrow}^\dagger d_{\downarrow} \\
H_{mix} &= \sum_{j,\sigma} V_j^s d_{\sigma}^\dagger s_{j,\sigma} + \text{H.c.} + \sum_{j,\sigma} V_j^b d_{\sigma}^\dagger b_{j,\sigma} + \text{H.c.}
\end{aligned} \tag{3.49}$$

donde $s_{j,\sigma}^\dagger$ ($b_{j,\sigma}^\dagger$) crea un electrón en el j -ésimo estado de conducción de la superficie (bulk). Suponemos que el problema de los electrones de la superficie en presencia de un corral cuántico

o en la superficie limpia, está resuelto y que los estados $\psi_{j\sigma}^s(\vec{r}) = \langle \vec{r} | s_{j,\sigma}^\dagger | 0 \rangle$ son los autoestados en el caso que corresponda (en la sección siguiente daremos un ejemplo para el caso de un corral circular). De esta manera se omite en la expresión del hamiltoniano de la Ec.(3.49) un término que de cuenta del potencial de confinamiento en el caso de existir un corral. El operador d_σ^\dagger crea un electrón en la impureza, situada en la posición \vec{r}_i en la superficie. Suponemos que la hibridización puede escribirse como [47]

$$\begin{aligned} V_j^s &= V_s l_{Cu} \psi_j^s(\vec{r}_i), \\ V_j^b &= V_b \psi_j^b(\vec{r}_i). \end{aligned} \quad (3.50)$$

Los parámetros V_s y V_b son elementos de hopping en un modelo tight-binding y $l_{Cu} = \sqrt{1/N_{Cu}} = 2.38 \text{ \AA}$, donde N_{Cu} es el número de átomos de Cu por unidad de superficie. Suponemos además una densidad de estados de bulk constante, aunque recientes estudios teóricos [88, 89, 96] apuntan hacia una significativa dependencia de los elementos de matriz con el vector de onda \vec{k} .

3.3.1 Estados confinados en un corral circular

Con el objeto de estudiar los efectos del confinamiento electrónico en un corral cuántico, se propuso utilizar una geometría circular, dado que este modelo posee una solución analítica sencilla, lo que a su vez simplifica el tratamiento del problema de muchos cuerpos. Por otra parte, se han realizado experimentos en esta geometría [97] para estudiar el efecto de interacciones entre dos impurezas y la presencia simultánea de dos espejismos cuánticos. Más allá de esto, el mismo tratamiento que aquí se presenta puede ser extendido a un caso más general.

El punto inicial de nuestra descripción de los electrones en la superficie es un gas de electrones 2D no interactuantes, que representa a la banda superficial del metal noble o Cu (111). La barrera de átomos que forman el corral circular se modeló mediante un potencial continuo deltiforme $W\delta(r - r_0)$, donde r es la distancia al centro del círculo y r_0 su radio. La aproximación de una barrera continua simplifica notablemente el tratamiento y está basada en el hecho que la longitud de onda de los electrones en el nivel de Fermi es de $\lambda_F \approx 30 \text{ \AA}$, mientras que la separación atómica entre los átomos del corral es de $\approx 10 \text{ \AA}$, lo que desde el punto de vista de los electrones confinados, produce que la discretización de las paredes del corral no pueda ser distinguida.

La proyección del momento angular perpendicular al plano de la superficie $l_z = \pm m$ es un buen número cuántico, debido a la simetría de rotación alrededor del centro del corral. Para cada m y energía $E = (\hbar k)^2/2m_e^*$, donde m_e^* es la masa efectiva de los electrones, los autoestados de la superficie pueden describirse de la forma $\psi_{k,m}(r, \theta) = \phi_{k,m}(kr)e^{im\theta}$ en coordenadas polares, y la ecuación de Schrödinger radial 2D se escribe como

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e^*} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial \phi_{km}}{\partial r} \right) + \left[\frac{(\hbar m)^2}{2m_e^* r^2} + W\delta(r - r_0) - E \right] \phi_{km} = 0. \quad (3.51)$$

Las soluciones a esta ecuación radial pueden ser escritas como

$$\begin{aligned} \phi_{k,m}^< &= f(k) J_m(kr) \\ \phi_{k,m}^> &= f(k) (A_m(k) J_m(kr) + B_m(k) Y_m(kr)), \end{aligned} \quad (3.52)$$

3.3 Modelo para una impureza magnética en una superficie nanoestructurada 65

donde $f(k)$ es una constante de normalización, $J_m(Y_m)$ es la función de Bessel de orden m de primera (segunda) especie, y los coeficientes $A_m(k)$ y $B_m(k)$ son funciones del momento k . De la condición de continuidad de ϕ_{km} , y de la discontinuidad de su derivada primera en r_0 , y utilizando expresiones conocidas para las derivadas de la función de Bessel, se obtiene

$$\begin{aligned} A_m(k) &= 1 + \frac{2m_e^*W/(\hbar^2k)}{\frac{Y_{m+1}(kr_0)}{Y_m(kr_0)} - \frac{J_{m+1}(kr_0)}{J_m(kr_0)}}, \\ B_m(k) &= (1 - A_m(k)) \frac{J_m(kr_0)}{Y_m(kr_0)}. \end{aligned} \quad (3.53)$$

En presencia de una barrera W finita, los autoestados forman un continuo dado por los valores reales de k . Sin embargo, resulta muy útil para simplificar la descripción física del corral circular vacío, realizar un desarrollo utilizando los *autoestados resonantes* [50, 98, 99] del mismo. En particular podemos realizar una expansión de la función de Green dentro del corral en términos de una contribución de estos estados discretos. La función de Green no interactuante de los electrones superficiales puede ser definida como

$$G_{ss}^0(z; \vec{r}_1, \vec{r}_2) \equiv \sum_{k,m} \frac{\bar{\psi}_{k,m}(\vec{r}_1) \psi_{k,m}(\vec{r}_2)}{z - \epsilon_{k,m}}, \quad (3.54)$$

$$= \sum_m \int_0^\infty dk \frac{dn}{dk} f^2 \frac{J_m(kr) J_m(kr') e^{im(\theta-\theta')}}{\left(z - \frac{(\hbar k)^2}{2m_e^*}\right)}, \quad (3.55)$$

En principio, esta última integral puede extenderse al plano k complejo y evaluarse por el método de residuos. Un problema técnico es que las funciones de Bessel divergen para k imaginario infinito, y debe entonces suponerse una energía de corte para completar la integral en un contorno infinito. Esto sin embargo no altera la física del problema ya que en los sistemas de la materia condensada siempre existe una energía de corte o *cut-off* natural dado, por ejemplo, por el ancho de la banda de conducción del gas de electrones 2D. Extendemos analíticamente la integral de la Ec. (3.55) al plano complejo, suponiendo un contorno de integración cerrado de radio $R \rightarrow \infty$ en el semiplano superior como en la Fig. 3.1. La contribución de los bordes en $R \rightarrow \infty$ se anula suponiendo una energía de corte, y la complicada expresión integral de la función de Green no interactuante (Ec. (3.1)) puede expresarse en términos de los residuos en los polos como [50, 98, 99]

$$G_{ss}^0(z; r, \theta, r', \theta') = \sum_{n,m} \frac{C_n^m J_m(k_n^m r) J_m(k_n^m r') e^{im(\theta-\theta')}}{z - \epsilon_n^m + i\delta_n^m}, \quad (3.56)$$

donde k_n^m son los polos complejos que provienen del término de normalización $f^2(k)$, dado que las funciones de Bessel $J_m(z)$ son analíticas en todo el plano complejo [100]. Los coeficientes C_n^m son los residuos del integrando en los polos

$$C_n^m = -\frac{i k_n^m}{\left. \frac{\partial(A_m^2(k)+B_m^2(k))}{\partial k} \right|_{k=k_n^m}}. \quad (3.57)$$

Los polos complejos k_n^m representan los valores discretos de los autoestados resonantes, y verifican $(\hbar k_n^m)^2/2m_e^* = \epsilon_n^m + i\delta_n^m$, donde ϵ_n^m representa la energía del estado resonante y δ_n^m el ancho correspondiente a ese estado. Se verifica que en el límite $W \rightarrow \infty$, $\delta_n^m \rightarrow 0$, recuperándose el límite del corral circular con paredes perfectamente rígidas. Considerando los polos complejos con energías menores a 2 o 3 veces E_F se logra una descripción muy razonable de la densidad de estados de conducción en el corral para las energías menores al nivel de Fermi [50, 98].

En el cálculo del problema de muchos cuerpos, es importante conocer las propiedades del sistema no interactuante cerca de E_F . Para tal fin se define la cantidad δ_F como el ancho δ_n^m del nivel resonante más cercano a E_F .

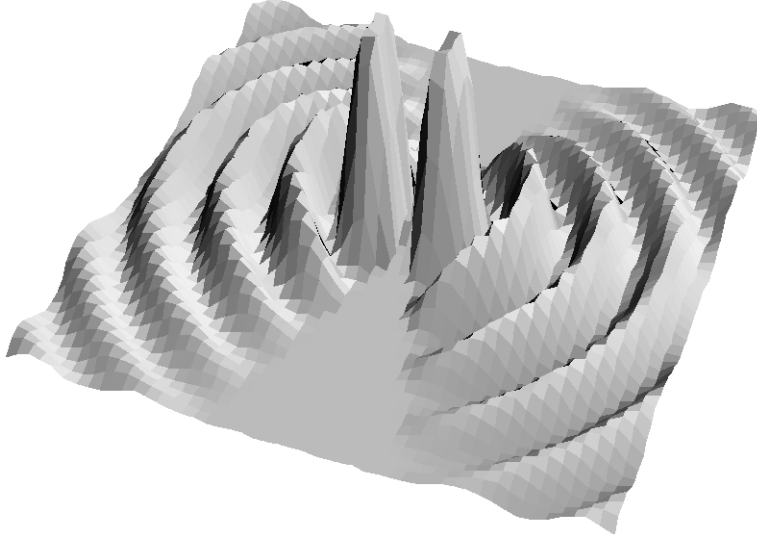


Figura 3.2: Densidad del estado en el nivel de Fermi con simetría par, para un corral circular de $r_0 = 63.5$ Å y $W = 7\hbar^2/2m_e^*r_0 \simeq 1.19$ eV Å.

Para poner un caso concreto, se estudió un corral circular con $r_0 = 63.5$ Å, como el realizado en experimentos recientes [97]. El valor de la energía del fondo de la banda de conducción de la superficie $D_s \approx -0.4$ eV se obtuvo de las mediciones experimentales de STM [79] en Cu(111). Con estos parámetros, el nivel que cae en E_F es el estado $k_{n=4}^{m=1}$. Los valores del parámetro W se fijaron de tal manera de reproducir el ancho δ_F observado en diversos experimentos [79, 46]. Para el valor observado de $\delta_F = \delta_4^1 = 40$ meV, es necesario fijar $W = 7\hbar^2/2m_e^*r_0 \simeq 1.19$ eV Å, donde se utilizó el valor de la masa efectiva electrónica en la superficie de Cu(111) $m_e^* = 0.38m_e$ [79, 101].

En la Fig. 3.2 se muestra la dependencia espacial de $|J_1(k_4^1 r) \cos \theta|^2$, la densidad del estado con simetría par en el nivel de Fermi. El estado ortogonal a éste es proporcional a $\sin \theta$. Mediante la expansión de la Ec.(3.56) es posible obtener la densidad local de estados

3.3 Modelo para una impureza magnética en una superficie nanoestructurada 67

de conducción para puntos interiores al corral usando [61, 56]

$$\rho_s^0(\omega, r, \theta) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} G_{ss}^0(\omega + i0^+; r, \theta, r, \theta) \quad (3.58)$$

En adelante, dada la simetría de rotación del círculo, se omitirá la variable θ .

La Fig. 3.3 muestra la densidad local $\rho_s^0(\omega, r)$ a distintas posiciones radiales. Se observa que las curvas se anulan para $\omega < D_s = -0.4$ eV, es decir, por debajo de la energía corte no hay estados accesibles. En general, todas las curvas presentan resonancias que se ensanchan a medida que aumenta la energía. Esto simplemente refleja el hecho de que un electrón de la superficie tiene más probabilidad de salir del corral cuanto mayor es su energía, es decir, su vida media se acorta. Cerca del fondo de la banda superficial, los estados tienen una vida media mucho mayor. Los estados que contribuyen a $\rho_s^0(\omega, r = 0)$ (línea continua en la Fig. 3.3) son solamente los estados con proyección angular $m = 0$, dado que son los únicos que tienen peso en el centro del corral por no sentir los efectos de la barrera centrífuga. En cambio, para otras posiciones en el corral, $\rho_s^0(\omega, r)$ es una suma de contribuciones de estados con diferente número cuántico m . En general, si fijamos una energía y nos movemos a lo largo del radio del círculo, vemos que las resonancias modifican su intensidad. Por ejemplo, la resonancia $k_{n=4}^{m=1}$ en el nivel de Fermi, tiene un máximo en $r/r_0 \approx 0.15$, dado que la función de Bessel $J_{m=1}(k_{n=4}^{m=1}r)$ tiene allí su primer y más intenso máximo (ver Ec.(3.56)). Es esta variación en la intensidad de $\rho_s^0(\omega, r)$ con la posición la que podría utilizarse para dilucidar la

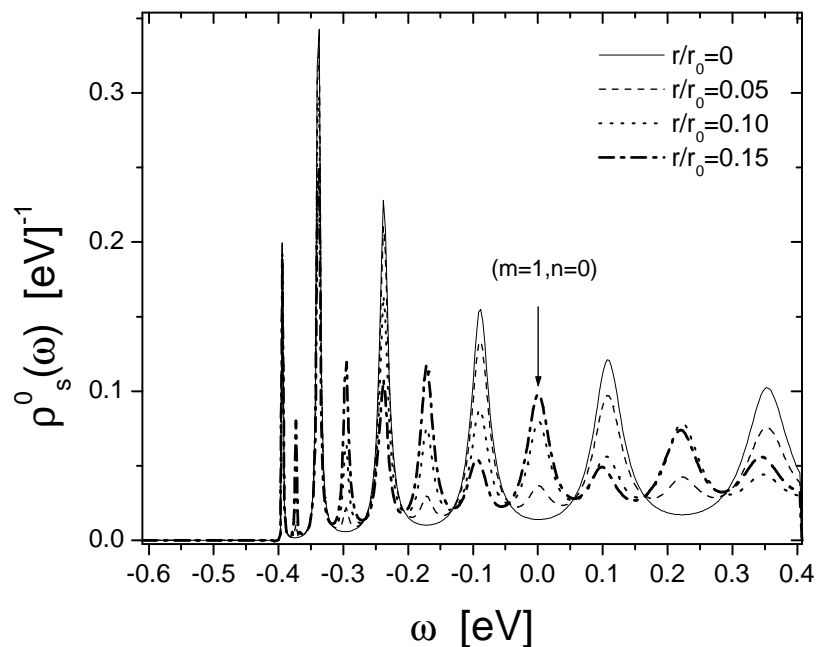


Figura 3.3: Densidad de estados no perturbada ρ_s^0 de un corral circular de radio $r_0 = 6.35$ nm, en función de la energía. El parámetro W ha sido ajustado para obtener un ancho en el estado resonante en el nivel de Fermi a $r/r_0 = 0.15$ de $\delta_F \approx 40$ meV.

contribución relativa de los estados de superficie y de bulk al singlete Kondo, dado que éstos últimos no presentan variación con la posición.

Cálculos numéricos realizados en un corral circular de las mismas dimensiones y valor de W [50] indican una variación aproximadamente lineal de los anchos δ_n^m en función de la energía ϵ_n^m , $\delta_n^m \simeq a\epsilon_n^m$. Esta variación puede verse indirectamente en los anchos de los niveles en la Fig. 3.3. Sin embargo, las mediciones experimentales de la densidad local de estados en un círculo [79] indican una variación mucho más suave de los anchos para el rango de energías de interés, en la forma aproximada $\delta_n^m \simeq \delta_0 + a'\epsilon_n^m$, con $a' \ll a$. Esta discrepancia puede deberse a la existencia de mecanismos adicionales de decaimiento (por ej.: scattering contra los átomos del corral) que no están considerados en este modelo para el corral cuántico y que conducen a una variación más suave de los anchos con la energía. De cualquier manera, esto no altera las conclusiones generales debido a que lo más importante para el problema de muchos cuerpos ocurre cerca de E_F y a que la discretización inducida por el corral separa a los estados uno de otro. De cualquier manera, la incorporación de más canales de decaimiento es posible generalizando apropiadamente el modelo propuesto.

3.3.2 Método de bosones esclavos en campo medio.

Dado que el método de bosones esclavos en campo medio da la dependencia exponencial correcta de T_K en función de los parámetros del modelo de Anderson, es una buena aproximación para estudiar las propiedades del sistema cerca de la energía de Fermi.

El hamiltoniano de la Ec. (3.49) en el límite $U \rightarrow \infty$ se escribe en la representación bosónica de Coleman en la forma

$$H = H_{sup} + H_{bulk} + H_d + H_{mix} + H_{constr}, \quad (3.59)$$

$$H_{sup} = \sum_{j,\sigma} \epsilon_j^s s_{j,\sigma}^\dagger s_{j,\sigma}, \quad (3.60)$$

$$H_{bulk} = \sum_{j,\sigma} \epsilon_j^b b_{j,\sigma}^\dagger b_{j,\sigma}, \quad (3.61)$$

$$H_d = \epsilon_d \sum_{\sigma} f_{\sigma}^\dagger f_{\sigma}, \quad (3.62)$$

$$H_{mix} = \sum_{j,\sigma} V_j^s f_{\sigma}^\dagger e s_{j,\sigma} + \text{H.c.} + \sum_{j,\sigma} V_{j,\sigma}^b f_{\sigma}^\dagger e b_{j,\sigma} + \text{H.c.}, \quad (3.63)$$

$$H_{constr} = \left(e^\dagger e + \sum_{\sigma} f_{\sigma}^\dagger f_{\sigma} - 1 \right) \lambda. \quad (3.64)$$

Las ecuaciones que surgen al minimizar el valor medio de $\langle H_{eff} \rangle$, donde H_{eff} es el hamiltoniano que se obtiene al realizar la aproximación de punto de ensilladura en la Ec. (3.59), son

$$\frac{\partial \langle H_{eff} \rangle}{\partial \lambda} = 0 \rightarrow e_0^2 = 1 - \sum_{\sigma} \langle n_{f,\sigma} \rangle, \quad (3.65)$$

$$\frac{\partial \langle H_{eff} \rangle}{\partial e_0} = 0 \rightarrow 0 = \lambda + \frac{1}{2e_0} \sum_{j,\sigma} \langle V_j^s f_{\sigma}^\dagger s_j + \text{H.c.} \rangle + \frac{1}{2e_0} \sum_{j,\sigma} \langle V_j^b f_{\sigma}^\dagger b_j + \text{H.c.} \rangle \quad (3.66)$$

donde hicimos uso del teorema de Hellman-Feynman. Utilizando ecuaciones de movimiento [93]

$$\begin{aligned} (\omega - \epsilon_d) \langle \langle f_\sigma; f_\sigma^\dagger \rangle \rangle &= 1 + \sum_j e_0 V_j^s \langle \langle s_{j,\sigma}; f_\sigma^\dagger \rangle \rangle + \sum_j e_0 V_j^b \langle \langle b_{j,\sigma}; f_\sigma^\dagger \rangle \rangle, \\ (\omega - \epsilon_j^s) \langle \langle s_{j,\sigma}; f_\sigma^\dagger \rangle \rangle &= e_0 \bar{V}_j^s \langle \langle f_\sigma; f_\sigma^\dagger \rangle \rangle, \\ (\omega - \epsilon_j^b) \langle \langle b_{j,\sigma}; f_\sigma^\dagger \rangle \rangle &= e_0 \bar{V}_j^b \langle \langle f_\sigma; f_\sigma^\dagger \rangle \rangle, \end{aligned} \quad (3.67)$$

$$(3.68)$$

donde se utilizó la notación de Zubarev [93] $\langle \langle f_\sigma; f_\sigma^\dagger \rangle \rangle \equiv G_{ff,\sigma}$, $\langle \langle s_{j,\sigma}; s_{j,\sigma}^\dagger \rangle \rangle \equiv [G_{ss,\sigma}]_{jj}$ y $\langle \langle b_{j,\sigma}; b_{j,\sigma}^\dagger \rangle \rangle \equiv [G_{bb,\sigma}]_{jj}$ y, utilizando las definiciones de las Ecs.(3.54) y (3.50), podemos escribir explícitamente en coordenadas cartesianas

$$G_{ff}(z, \vec{r}_i) = [z - (\epsilon_d + \lambda)(l_{Cu} V_s e_0)^2 G_{ss}^0(z, \vec{r}_i, \vec{r}_i) - (V_b e_0)^2 G_{bb}^0(z, \vec{r}_i, \vec{r}_i)]^{-1},$$

donde se ha eliminado el índice de spin para simplificar la notación. Vemos que aparece una dependencia espacial en G_{ff} por el hecho de estar la impureza hibridizada con los estados superficiales a través de los elementos de matriz de la Ec. (3.50). Los valores medios de las Ecs. (3.65) y (3.66) se evalúan como

$$\begin{aligned} \langle n_{f,\sigma} \rangle(\vec{r}, e_0, \lambda) &= -\frac{1}{\pi} \int d\omega n_F(\omega) \text{Im} G_{ff}(\omega + i0^+, \vec{r}_i), \\ S(\vec{r}_i, e_0, \lambda) &\equiv \frac{1}{e_0} \sum_j \langle V_j^s f_\sigma^\dagger s_j + \text{H.c.} \rangle, \\ &= -\frac{2(l_{Cu} V_s)^2}{\pi} \int d\omega n_F(\omega) \text{Im} [G_{ss}^0(\omega + i0^+, \vec{r}_i, \vec{r}_i) G_{ff}(\omega + i0^+, \vec{r}_i)], \\ B(\vec{r}_i, e_0, \lambda) &\equiv \frac{1}{e_0} \sum_j \langle V_j^b f_\sigma^\dagger b_j + \text{H.c.} \rangle, \\ &= -\frac{2}{\pi} V_b^2 \int d\omega n_F(\omega) \text{Im} [G_{bb}^0(\omega + i0^+, \vec{r}_i, \vec{r}_i) G_{ff}(\omega + i0^+, \vec{r}_i)], \end{aligned}$$

donde $n_F(\omega)$ es la función de Fermi y donde se utilizó el desarrollo de G_{ss}^0 en términos de polos complejos de la Ec. (3.56).

3.4 Cálculo de la conductancia túnel

En un experimento de STM, el objeto de medición es la corriente túnel que se establece entre la punta del STM y la muestra. Esta corriente contiene información acerca de la estructura electrónica de la muestra, que puede ser analizada en función de la diferencia de potencial V aplicada entre la muestra y la punta del STM. La corriente túnel en la posición bidimensional \vec{r}_t de la punta del STM se relaciona con la estructura electrónica de la muestra en la forma [51, 98]

$$I(\vec{r}_t) \propto \sum_\sigma \int_{E_F}^{E_F+eV} d\omega \rho_{t\sigma}(\omega, \vec{r}_t). \quad (3.69)$$

Derivando respecto de la diferencia de potencial V

$$\frac{dI}{dV}(\vec{r}_t) \propto \sum_{\sigma} \rho_{t\sigma}(\omega, \vec{r}_t) = -\frac{1}{\pi} \sum_{\sigma} \text{Im} G_{tt,\sigma}^r(\omega, \vec{r}_t), \quad (3.70)$$

donde $G_{tt,\sigma}^r(\omega, \vec{r}_t)$, es la función de Green retardada de los electrones de la muestra que se acoplan con la punta del STM. En general, debido a que el decaimiento de los estados Schockley en la dirección perpendicular a la superficie es mucho menor que el de las funciones de onda de los estados d del átomo de Co, la punta del STM se acopla con principalmente con los electrones de conducción superficiales. Sin embargo, una parte de la corriente túnel podría venir de un acoplamiento directo con la impureza, cuando $\vec{r}_t = \vec{r}_i$, donde \vec{r}_i es el sitio de la impureza de Co. Y otra parte de la corriente túnel podría venir de un acoplamiento directo con los electrones del bulk. De esta manera, la forma más general del estado que se acopla con la punta del STM está dada por [98]

$$\Psi_{\sigma}^{\dagger}(\vec{r}_t)|0\rangle = \left[\sum_j \psi_j^s(\vec{r}_t) s_{j\sigma}^{\dagger} + p \sum_j \psi_j^b(\vec{r}_t) b_{j\sigma}^{\dagger} + q(|\vec{r}_t - \vec{r}_i\rangle) d_{\sigma}^{\dagger} \right] |0\rangle, \quad (3.71)$$

donde el operador de campo fermiónico $\Psi_{\sigma}^{\dagger}(\vec{r}_t)$ crea un electrón en el sitio \vec{r}_t que se transfiere a la punta del STM. Los parámetros p y $q(\vec{r})$ describen, respectivamente, el acoplamiento directo de la punta del STM con los estados de bulk y con la impureza. Debido a la fuerte localización de los electrones d , en adelante se supondrá $q(\vec{r}) = q\delta(\vec{r})$. Para obtener una expresión de $G_{tt,\sigma}^r(\omega, \vec{r}_t)$ en términos de funciones de Green conocidas, utilizamos las ecuaciones de movimiento

$$\begin{aligned} (\omega - \epsilon_j^c) \langle\langle c_{j,\sigma}; c_{j',\sigma}^{\dagger} \rangle\rangle &= \delta_{j,j'} + \bar{V}_j^c \langle\langle d_{\sigma}; c_{j',\sigma}^{\dagger} \rangle\rangle, \\ (\omega - \epsilon_j^c) \langle\langle d_{\sigma}; c_{j',\sigma}^{\dagger} \rangle\rangle &= V_{j'}^c \langle\langle d_{\sigma}; d_{\sigma}^{\dagger} \rangle\rangle, \end{aligned} \quad (3.72)$$

donde $c = s$ o b . Para facilitar la notación, en lo sucesivo se omite el índice de spin. Calculando las funciones de Green no interactuantes de los electrones del bulk y de la superficie como [64]

$$G_{cc}^0(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \omega) = \sum_j \frac{\bar{\psi}_j^c(\vec{r}_1) \psi_j^c(\vec{r}_2)}{\omega - \epsilon_j^c}, \quad (3.73)$$

se puede obtener una expresión para la función de Green de interés

$$G_{tt}(\vec{r}_t, \vec{r}_i, \omega) = (l_{Cu})^2 G_{ss}^0(\vec{r}_t, \vec{r}_i, \omega) + p^2 G_{bb}^0(\vec{r}_t, \vec{r}_i, \omega) + \Delta G_{tt}(\vec{r}_t, \vec{r}_i, \omega), \quad (3.74)$$

$$\Delta G_{tt}(\vec{r}_t, \vec{r}_i, \omega) = F(\vec{r}_t, \vec{r}_i, \omega) F(\vec{r}_i, \vec{r}_t, \omega) G_{dd}(\omega), \quad (3.75)$$

$$F(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \omega) = V_s (l_{Cu})^2 G_{ss}^0(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \omega) + p V_b G_{bb}^0(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \omega) + q(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|). \quad (3.76)$$

De estas ecuaciones se desprende que la dependencia espacial de la conductancia diferencial está dada enteramente a través de las funciones no interactuantes G_{ss}^0, G_{bb}^0 . Por otro lado, la parte no trivial de este cálculo es la obtención de G_{dd} , que tiene los efectos de las

correlaciones. La observación de una resonancia de Fano de ancho T_K [46, 7] en la cantidad $\Delta dI/dV$ en el sitio de la impureza puede entenderse de manera sencilla para la superficie abierta suponiendo que $p = q = 0$ en las Ecs. (3.74), (3.75) y (3.76). En ese caso, la función de Green G_{ss}^0 puede aproximarse como

$$G_{ss}^0(\vec{r}_t, \vec{r}_t, \omega) = \sum_j \frac{1}{\omega + i0^+ - \epsilon_j^s} \approx \rho_s \left[\ln \left| \frac{D + \omega}{D - \omega} \right| - i\pi\theta(D - |\omega|) \right], \quad (3.77)$$

donde D es el semiancho de la banda de conducción y ρ_c es la densidad de estados de conducción. Con esta aproximación, puede verse fácilmente que, cerca del nivel de Fermi ($\omega \approx 0$)

$$\begin{aligned} \Delta \frac{dI}{dV}(\vec{r}_t, \vec{r}_t, \omega) &\propto \rho_{t\sigma}(\vec{r}_t, \vec{r}_t, \omega) - \rho_c, \\ &= -V_s^2 \rho_{d,\sigma}(\omega), \end{aligned} \quad (3.78)$$

donde se usaron las Ecs. (3.70) y (3.74)-(3.76). Lo interesante de este resultado es que indica la presencia de una antiresonancia en el nivel de Fermi si está presente el efecto Kondo. Este es el efecto fundamental de la física de Kondo sobre los electrones de conducción en un espectro STM, y se interpreta tradicionalmente en el contexto de la nube de Kondo: los electrones de conducción “faltantes” (notar el signo - en la expresión de la Ec.(3.78)) se encuentran apantallando el momento magnético de la impureza.

En el caso más general en el que interfieren varios canales en la corriente túnel ($p, q \neq 0$), se obtiene una curva tipo Fano para $\Delta dI/dV$ [7].

3.5 Resultados

3.5.1 Cálculo de $\Delta dI/dV$ en función del voltaje en la superficie limpia

Dada la complejidad en las Ecs. (3.65) y (3.66), no hay soluciones analíticas sencillas y deben resolverse autoconsistentemente en forma numérica. Una vez que se obtienen los valores de λ y e_0 que satisfacen ambas ecuaciones simultáneamente, se pueden calcular las propiedades del sistema, como por ejemplo, las densidades de estados.

Primeramente, para poder comparar con los experimentos, se deben fijar los parámetros del modelo de Anderson de la Ec. (3.49). El parámetro ϵ_d se fijó usando el valor $\epsilon_d = -0.8$ eV de la Ref. [102], calculado mediante el método de LSDA y el método de Korringa, Kohn y Rostoker [9] para el caso de una impureza de Co sobre Au(111), en la que se obtiene una ocupación en el orbital $3d$ de $\langle n_d \rangle = 8.8$, es decir, una carga en exceso de 1.8 electrones respecto de su configuración electrónica $[\text{Ar}]3d^7 4s^2$ para el átomo de Co aislado. Esta carga en exceso debe ser apantallada por los electrones de conducción del metal [102].

El valor de la densidad de estados de bulk (suponiéndola constante) $\rho_b = 0.145/\text{eV}$ por sitio y por spin se obtuvo a partir del valor a la energía de Fermi calculada mediante métodos *ab-initio* [103], y de la relación de llenado de un electrón por sitio $2D_b\rho_b = 1$, se obtuvo el valor de D_b . La masa efectiva de los electrones 2D observada experimentalmente [79, 101] es $m_e^* = 0.38 m_e$, donde m_e es la masa del electrón. Con este valor, y suponiendo una relación

de dispersión parabólica se obtuvo el valor $\rho_s = 0.045/\text{eV}$ por sitio y por spin. Del valor del fondo de la banda de conducción superficial [79] se obtuvo $D_s = -0.4$ eV y por simplicidad, se supuso una banda de conducción superficial simétrica. El valor de p en las Ecs. (3.74) se fija basándose en que, para la superficie limpia, aproximadamente la mitad de la intensidad de dI/dV se debe a estados de bulk [7, 104, 105]⁴ De esta manera, el valor de p es $1/3$ para compensar el cociente $\rho_b/\rho_s \approx 3$. Comparando los resultados de los bosones esclavos con los datos experimentales, el parámetro q puede ser fijado para reproducir la asimetría de la curva de Fano de dI/dV .

El único parámetro libre que queda es el cociente V_s/V_b . Éste se utiliza para explorar los diferentes escenarios posibles y se impone fijando alguna relación entre los anchos Γ_s y Γ_b definidos como $\Gamma_s \equiv \pi\rho_s V_s^2$ y $\Gamma_b \equiv \pi\rho_b V_b^2$ respectivamente. En adelante estudiaremos dos casos: a) la contribución de los estados de bulk y de superficie al ancho es la misma, ($\Gamma_b = \Gamma_s$), y b) el ancho debido a la contribución del bulk es tres veces mayor a la de la superficie ($\Gamma_b = 3\Gamma_s$).

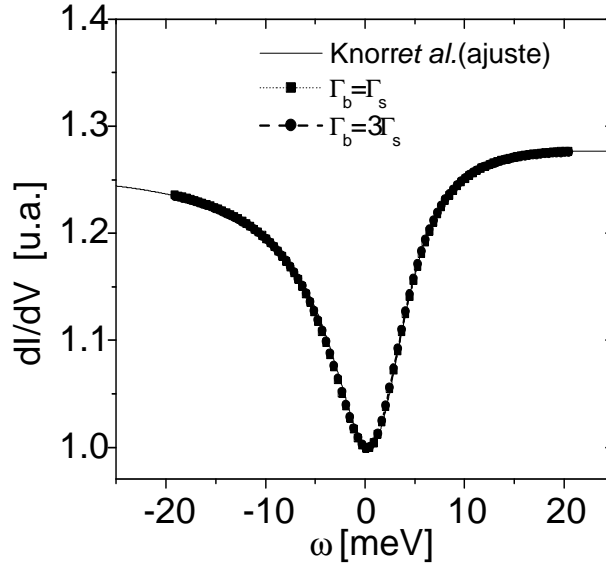


Figura 3.4: Comparación entre la expresión analítica usada en la Ref. [7] para ajustar la parte de bajas energías de la conductancia diferencial dI/dV y los resultados usando el método de bosones esclavos para $U \rightarrow \infty$ en campo medio.

Una primera comparación con la fórmula analítico de Knorr *et al* [7] (Fig. 3.4) para ajustar los datos experimentales a bajas energías, nos permite ajustar el parámetro q de las Ecs. (3.74). Mediante estos ajustes se obtienen los siguiente valores para el caso a): $q = 0.04$, $V_s = 0.895$ eV, $V_b = 0.499$ eV. Para el caso b) se obtuvo: $q = 0.035$, $V_s = 0.604$ eV, $V_b = 0.583$ eV.

⁴Esto surge de observar la magnitud del salto que se produce en dI/dV al superar la energía del fondo de la banda de conducción superficial

3.5.2 Cálculo de $\Delta dI/dV$ en función del voltaje dentro del corral

El estudio experimental de la dependencia en voltaje de $\Delta dI/dV$ para diferentes posiciones de la impureza dentro del corral podría ser útil para dilucidar el peso de las contribuciones de los estados de bulk y de superficie en la formación del singlete de Kondo. Donde las funciones de onda del corral tengan mayor amplitud, el elemento de matriz de hibridación con la impureza será mayor (véase la Fig. 3.5).

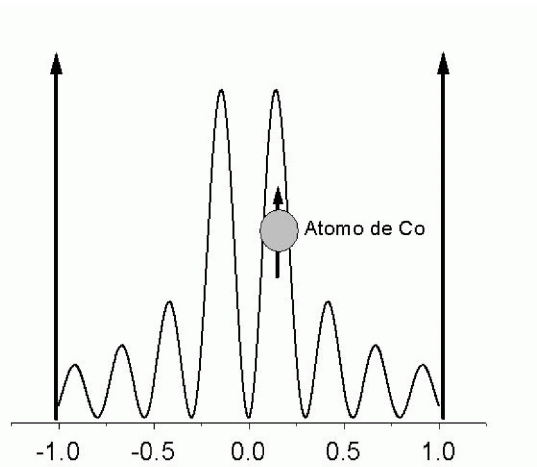


Figura 3.5: Átomo de Co en un corral circular.

En esta sección mostramos cálculos de la conductancia diferencial en función del voltaje para distintas posiciones de una impureza magnética dentro de un corral circular de radio $r_0 = 63.5 \text{ \AA}$, de forma tal que los estados resonantes degenerados $k_{n=4}^{m=\pm 1}$ (estados 37 y 38 del corral con paredes infinitas) se ubican en el nivel de Fermi. Experimentos en un corral de estas características han sido realizados para ilustrar la presencia simultánea de dos espejismos cuánticos [97].

En la Fig. 3.6 se muestra la variación de $\Delta\rho_t(\omega, r)$ (proporcional a $\Delta dI/dV$, véase la Ec.(3.70)) en función de la energía y al variar la posición de la impureza dentro del círculo. El valor de δ_F (ancho del nivel resonante en E_F , relacionado directamente con la altura del potencial de confinamiento W en la Ec.(3.51)), es $\delta_F = 20 \text{ meV}$ para reproducir el ancho observado experimentalmente en la Ref. [79].

En la Fig. 3.6(a) puede observarse la variación de $\Delta\rho_t(\omega, r)$ en el rango $r/r_0 = 0 - 0.15$. La antiresonancia de Fano para $r/r_0 = 0$ se debe casi exclusivamente al acoplamiento con los electrones de bulk ya que sólo los estados del círculo con $m = 0$ tienen peso apreciable allí. Además, observando la Fig. 3.3, puede verse que para $\omega = 0$, las otras resonancias del círculo están demasiado lejos para contribuir significativamente al estado de Kondo.

Al alejar la impureza del centro del círculo, se observa una importante variación de las curvas de $\Delta\rho_t(\omega)$, esencialmente debido a que comienzan a intervenir otros estados de superficie en el nivel de Fermi (ver Figura 3.3). Desde el punto de vista del método de bosones esclavos,

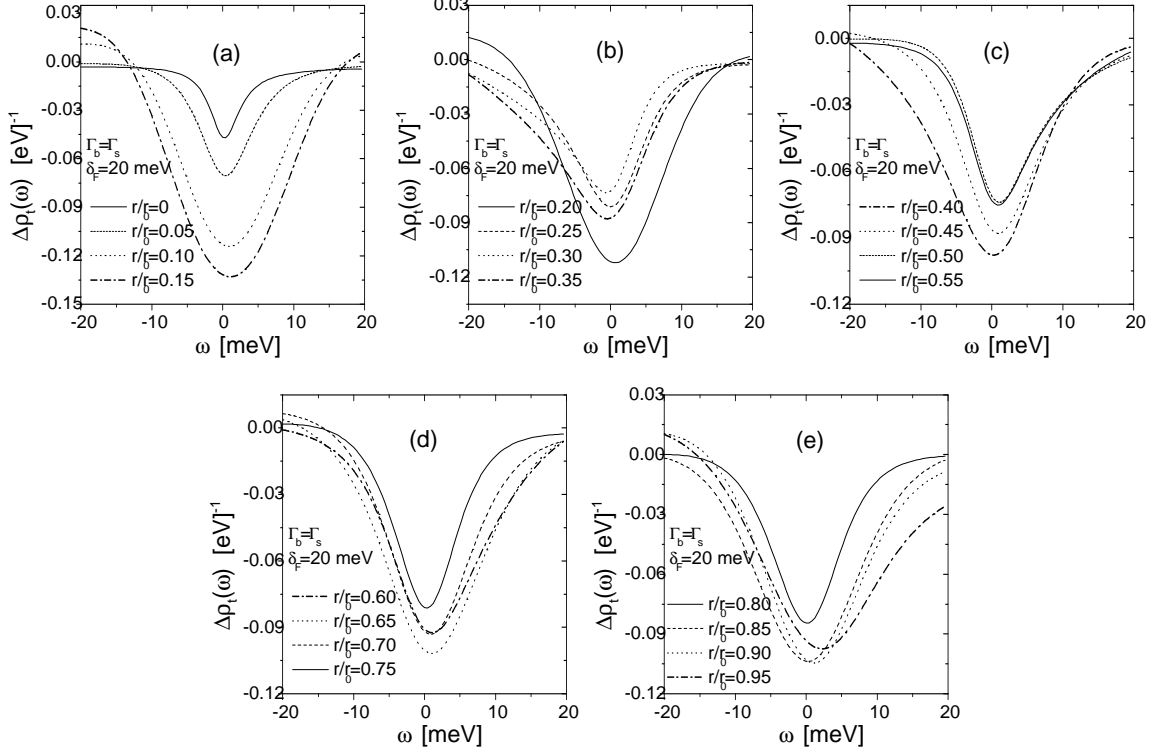


Figura 3.6: Conductancia diferencial $\Delta\rho_t(\omega)$ en función de la energía, para distintas posiciones de la impureza dentro del corral [98]. En estos cálculos se utilizó $\delta_F = 20$ meV y la relación de V_s/V_b está fijada por $\Gamma_s = \Gamma_b$. En todos los gráficos, la punta del STM se encuentra sobre la impureza.

la presencia de más estados de conducción produce un valor de e_0^2 mayor (ver Ec.(3.38)), lo que se traduce en una antiresonancia más ancha y más profunda, de acuerdo a

$$\begin{aligned} \Delta \frac{dI}{dV}(\vec{r}_t) \propto \Delta\rho_t(\omega, r) &= -\frac{1}{\pi} \text{Im} \Delta G_{tt}(\omega + i0^+, r) = -|F(r, r, \omega)|^2 \rho_d(\omega, r), \\ &\approx -e_0^2 |F(r, r, \omega)|^2 \rho_f(\omega, r), \end{aligned} \quad (3.79)$$

donde se utilizaron las Ecs. (3.70) y (3.75).

En las Fig. 3.7 y Fig. 3.8 se muestran cálculos análogos para un valor $\delta_F = 40$ meV (para reproducir el ancho observado en la Ref. [46]) y para los casos a): $\Gamma_b = \Gamma_s$ y b): $\Gamma_b = 3\Gamma_s$.

Comparando con la Fig. 3.6, al aumentar el valor de δ_F , se observa que las variaciones espaciales son menores que para el caso $\delta_F = 20$ meV. Esto se debe a que, al estar las resonancias del círculo más ensanchadas, hay más peso de otros estados con diferente forma espacial en el nivel de Fermi, lo que conduce a una “homogeneización” de las curvas en función de la posición.

Para el valor $\delta_F = 40$ meV (que reproduce los resultados observados en experimentos de Manoharan *et al.* [46]), la variación de $\Delta\rho_t(\omega)$ no permite decidir entre el caso a) y b). Una solución a esto sería reducir el tamaño del corral (“sintonizando” otro estado en

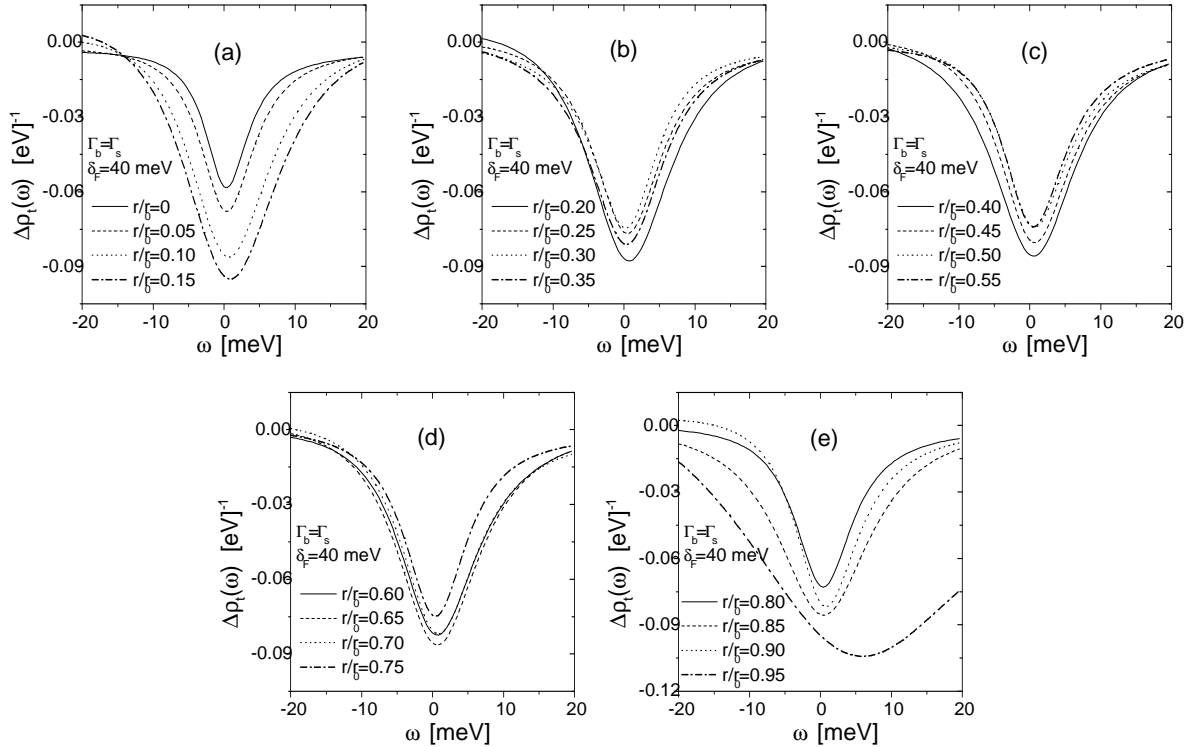


Figura 3.7: Conductancia diferencial $\Delta\rho_t(\omega)$ en función de la energía, para distintas posiciones de la impureza dentro del corral [98]. En estos cálculos se utilizó $\delta_F = 40$ meV y la relación de V_s/V_b está fijada por $\Gamma_s = \Gamma_b$. En todos los gráficos, la punta del STM se encuentra sobre la impureza.

E_F) para aumentar el espaciamiento entre los niveles del círculo y de esa forma disminuir la contribución de otros estados en el nivel de Fermi.

Los resultados para $r/r_0 > 0.9$ muestran una antiresonancia de Fano en $\Delta\rho_t(\omega)$ sobreestimada. La razón de ello es que a medida que la punta del STM se acerca al borde interno del corral, a una distancia r , la densidad de estados de conducción del corral crece por la contribución de estados con proyección $m \leq k_F r$. Es decir, el número de estados que contribuyen a la densidad de estados del corral crece con la distancia al centro.

Para entender cualitativamente cómo afecta esto al ancho de la antiresonancia, hay que recordar la variación exponencial de T_K con los parámetros del modelo de Anderson (ver Ec. (3.38)).

Un aumento en la densidad de estados se traslada en forma exponencial a un aumento en el ancho de la antiresonancia de Fano a través de la dependencia de T_K con los parámetros del modelo de Anderson. Cerca de las paredes del corral este ensanchamiento está exagerado, y para corregirlo habría que considerar la discretización atómica del corral [106, 107].

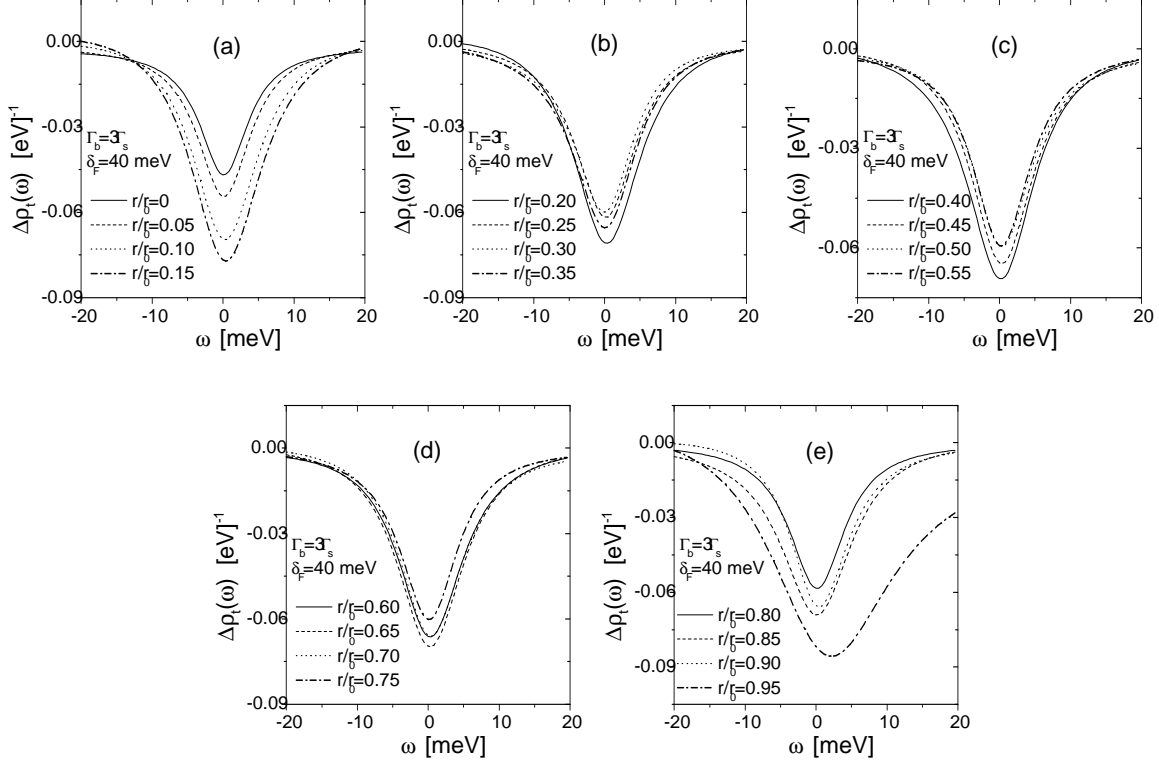


Figura 3.8: Conductancia diferencial $\Delta\rho_i(\omega)$ en función de la energía, para distintas posiciones de la impureza dentro del corral [98]. En estos cálculos se utilizó $\delta_F = 40$ meV y la relación de V_s/V_b está fijada por $\Gamma_s = 3\Gamma_b$. En todos los gráficos, la punta del STM se encuentra sobre la impureza.

3.6 Resumen y conclusiones

El cálculo de la dependencia de la conductancia túnel dI/dV en un corral cuántico, en presencia de una impureza magnética es un problema no trivial que exige, en primer lugar, una correcta descripción de la estructura electrónica del problema del corral vacío y, simultáneamente la incorporación de las correlaciones locales en el sitio de la impureza. Este problema es interesante desde el punto de vista teórico porque la física del efecto Kondo se ve fuertemente alterada cuando la estructura electrónica de la banda de conducción está modulada por efectos del confinamiento.

Una descripción razonable de un corral cuántico vacío lejos del borde puede lograrse con un modelo de pared continua deltiforme, gracias a que la separación de los átomos que forman las paredes del corral es menor que la longitud de onda de Fermi de los electrones 2D en el Cu(111). Para el caso del corral circular, la ecuación de Schrödinger 2D tiene soluciones analíticas muy sencillas que permiten explorar la física del problema sin demasiada complejidad matemática.

Una gran simplificación puede obtenerse describiendo el problema en términos de los

estados resonantes del corral. La función de Green no interactuante G_{ss}^0 puede expresarse formalmente de manera exacta como un desarrollo en términos de estas resonancias discretas (Ec. (3.56)). Posteriormente, aproximando este desarrollo mediante un truncamiento de los términos de mayor energía, se obtiene una descripción muy razonable de la densidad de estados cerca del nivel de Fermi.

Para tratar las correlaciones, se utilizó el modelo de impureza de Anderson generalizado para incorporar efectos del confinamiento y el método de bosones esclavos de Coleman ($U \rightarrow \infty$) en campo medio, que proporciona una descripción razonable de la estructura electrónica a $T = 0$ y cerca de la energía de Fermi. En particular, este método describe correctamente la física del efecto Kondo en términos de cuasipartículas fermiónicas no interactuantes.

Utilizando ecuaciones de movimiento, se pudo obtener la variación de $\Delta\rho_t(\omega, r)$ (cantidad relacionada directamente con la conductancia túnel dI/dV) para distintas posiciones dentro del corral. El método de bosones esclavos reproduce las antiresonancias observadas experimentalmente en la conductancia diferencial $dI/dV(\omega, r)$ cerca de E_F [46].

La modulación espacial de las funciones de onda de los electrones superficiales dentro del corral podría utilizarse para estimar los pesos relativos de las contribuciones bulk y de los estados de superficie en el singlete Kondo. Estudiamos dos casos: a) $\Gamma_b = \Gamma_s$ y b) $\Gamma_b = 3\Gamma_s$, para valores del potencial de confinamiento W tales que $\delta_F = 20$ meV y $\delta_F = 40$ meV. En el caso $\delta_F = 40$ meV, el ensanchamiento de los niveles no permite discernir claramente el caso a) del b). En ese caso se podrían achicar las dimensiones del corral, sintonizando otro estado en E_F , para minimizar el peso de otros niveles en E_F .

Los resultados de esta parte del trabajo se encuentran publicados en la Ref. [98].

Capítulo 4

Conductancia a través de arreglos de puntos cuánticos

4.1 Introducción

El estudio del transporte electrónico a través de sistemas nanoscópicos ha atraído mucha atención en los últimos años. Diversos experimentos en los que se ha observado la física del efecto Kondo en la conductancia a través de puntos cuánticos [2, 3, 4] han contribuido a generar un creciente interés en el estudio del transporte en estos sistemas.

Recientemente, la conductancia a través de circuitos formados por varios puntos cuánticos ha sido estudiada en forma teórica utilizando diversas técnicas, como el Grupo de Renormalización Numérico aplicado a un cluster de 4 puntos cuánticos [108]. Otros autores [109], utilizando técnicas de diagonalización exacta más embebimiento, estudiaron el transporte a través de arreglos lineales de hasta 5 puntos cuánticos. En este caso, se obtiene una llamativa cancelación de la conductancia cuando el número de puntos cuánticos es impar y mayor que 1, y cuando el voltaje de compuerta V_g que regula la carga en los puntos cuánticos induce simetría electrón-hueco. Utilizando una descripción de cuasipartícula, otros autores han obtenido una conductancia de $G_0 = 2e^2/h$ bajo condiciones de simetría electrón-hueco y número de puntos cuánticos impar [110]. Desde el punto de vista experimental, se ha conseguido establecer el *diagrama de estabilidad* de un arreglo de 3 puntos cuánticos en un régimen de pocos electrones [111], lo que constituye un primer avance hacia el control las propiedades en estos sistemas.

El propósito de esta parte del trabajo de tesis es contribuir al entendimiento del transporte a través de circuitos formados por varios puntos cuánticos, haciendo especial énfasis en el estudio de los efectos de las correlaciones locales. En la sección 4.2 se describe el modelo y las aproximaciones utilizadas. En la sección 4.3 se detalla el cálculo de la conductancia y se exponen los principales resultados de este trabajo. La sección 4.5 está destinada a una discusión sobre la validez del método, y finalmente en la sección 4.6 se encuentra el resumen y conclusiones.

4.2 Modelo para un arreglo de puntos cuánticos interactuantes

Diversos trabajos teóricos [2, 3, 4] han permitido entender las propiedades de la conductancia a través de un solo punto cuántico interactuante en términos de modelos de impureza de Anderson o de Kondo. Sintonizando adecuadamente los voltajes de compuerta, pueden cargarse o descargarse los puntos cuánticos, de forma tal que en un cierto rango de voltajes, estos modelos efectivamente describen el comportamiento de los electrones. Para estudiar la conductancia a través de N_d puntos cuánticos interactuantes, en configuraciones arbitrarias, una generalización adecuada es el modelo

$$H = H_c + H_d + H_{mix}, \quad (4.1)$$

donde H_c es el hamiltoniano que describe los contactos no interactuantes, representados por cadenas semi-infinitas no interactuantes

$$H_c = \sum_{i=0,\sigma}^{-\infty} \left(-t_c c_{i,\sigma}^\dagger c_{i-1,\sigma} + \text{H.c.} \right) + \sum_{i=N_d+1,\sigma}^{\infty} \left(-t_c c_{i,\sigma}^\dagger c_{i+1,\sigma} + \text{H.c.} \right). \quad (4.2)$$

El término H_d es un término tipo Hubbard que describe al arreglo de puntos cuánticos, donde por simplicidad cada punto cuántico se lo describe con un sólo nivel

$$H_d = \sum_{i=1,\sigma}^{N_d} \left(E_{d,i} d_{i,\sigma}^\dagger d_{i,\sigma} + U_i n_{i,\uparrow} n_{i,\downarrow} \right) - \sum_{i<j,\sigma}^{N_d} t_{i,j} d_{i,\sigma}^\dagger d_{j,\sigma} + \text{H.c.}, \quad (4.3)$$

donde $E_{d,i}$ y U_i son las energías diagonales y la repulsión coulombiana en el punto cuántico i , respectivamente. Pueden lograrse diferentes configuraciones variando los hoppings $t_{i,j}$ que conectan al punto cuántico i con el j . Cada uno de estos parámetros puede ser modificado mediante la modificación de voltajes en alguna parte del circuito. Finalmente el término H_{mix} acopla el sistema con los contactos

$$H_{mix} = V \left[\sum_{\sigma} \left(d_{1,\sigma}^\dagger c_{0,\sigma} + d_{N_d,\sigma}^\dagger c_{N_d+1,\sigma} \right) + \text{H.c.} \right], \quad (4.4)$$

mediante el elemento de hopping V .

4.2.1 Modelo para $N_d = 3$ puntos cuánticos

Para ejemplificar el método utilizado con un caso concreto, vamos a comenzar estudiando un arreglo lineal de 3 puntos cuánticos. Por simplicidad, se supone que los puntos cuánticos son equivalentes y sus energías diagonales se controlan con un voltaje de compuerta V_g que permite variar la carga en los mismos. Un esquema del sistema se muestra en la Fig. 4.1.

Especificando el hamiltoniano de la Ec. (4.1) para $N_d = 3$ se obtiene

$$H = H_c + H_d + H_{mix}, \quad (4.5)$$

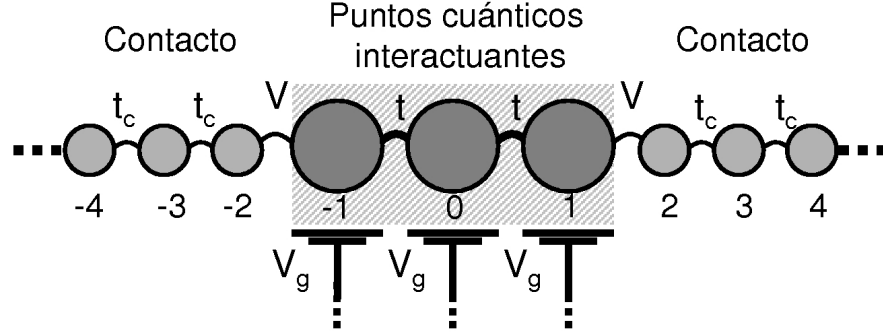


Figura 4.1: Esquema del sistema estudiado.

donde

$$H_c = \sum_{i=-2,\sigma}^{-\infty} \left(-t_c c_{i,\sigma}^\dagger c_{i-1,\sigma} + \text{H.c.} \right) + \sum_{i=2,\sigma}^{\infty} \left(-t_c c_{i,\sigma}^\dagger c_{i+1,\sigma} + \text{H.c.} \right), \quad (4.6)$$

$$H_d = \sum_{i=-1,\sigma}^1 \left(E_d d_{i,\sigma}^\dagger d_{i,\sigma} + U n_{i,\uparrow} n_{i,\downarrow} \right) - \sum_{\sigma} \left[t \left(d_{-1,\sigma}^\dagger d_{0,\sigma} + d_{0,\sigma}^\dagger d_{1,\sigma} \right) + \text{H.c.} \right], \quad (4.7)$$

$$H_{mix} = V \left[\sum_{\sigma} \left(d_{-1,\sigma}^\dagger c_{-2,\sigma} + d_{1,\sigma}^\dagger c_{2,\sigma} \right) + \text{H.c.} \right]. \quad (4.8)$$

La notación se ha elegido de manera tal que este hamiltoniano tenga explícitamente simetría de inversión con respecto al sitio $i = 0$, lo que puede verificarse haciendo la transformación

$$\begin{aligned} a_{i,\sigma} &\rightarrow a_{-i,\sigma}, \\ a_{i,\sigma}^\dagger &\rightarrow a_{-i,\sigma}^\dagger, \end{aligned} \quad (4.9)$$

(donde $a = c$ o d), en el hamiltoniano de la Ec.(4.5). Esto permite definir operadores con simetría de reflexión

$$a_{|i|,\pm,\sigma} = \frac{a_{i,\sigma} \pm a_{-i,\sigma}}{\sqrt{2}}, \quad (4.10)$$

$$a_{|i|,\pm,\sigma}^\dagger = \frac{a_{i,\sigma}^\dagger \pm a_{-i,\sigma}^\dagger}{\sqrt{2}}. \quad (4.11)$$

Con estos operadores, los términos del hamiltoniano de la Ec. (4.5) se pueden escribir como

$$H_c = \sum_{i=2, \nu=\pm, \sigma}^{\infty} \left(-t_c c_{i, \nu, \sigma}^\dagger c_{i+1, \nu, \sigma} + \text{H.c.} \right), \quad (4.12)$$

$$H_d = \sum_{\sigma} \left(E_d \left[\sum_{\nu=\pm} c_{1, \nu, \sigma}^\dagger c_{1, \nu, \sigma} + c_{0, \sigma}^\dagger c_{0, \sigma} \right] - \sqrt{2}t \left[c_{1, +, \sigma}^\dagger c_{0, \sigma} + \text{H.c.} \right] \right) + U \left(n_{0, \uparrow} n_{0, \downarrow} + \frac{1}{2} \left[\prod_{\sigma} (n_{1, +, \sigma} + n_{1, -, \sigma}) + \prod_{\sigma} (c_{1, +, \sigma}^\dagger c_{1, -, \sigma} + c_{1, -, \sigma}^\dagger c_{1, +, \sigma}) \right] \right), \quad (4.13)$$

$$H_{mix} = V \left[\sum_{\sigma, \nu=\pm} c_{1, \nu, \sigma}^\dagger c_{2, \nu, \sigma} + \text{H.c.} \right], \quad (4.14)$$

donde ν es la paridad.

4.2.2 Aproximación de un sitio efectivo

Supongamos que el voltaje de compuerta V_g es tal que se induce una carga en cada sitio de 1 electrón. Como todos los puntos cuánticos son equivalentes, todos tendrán la misma carga. En estas condiciones, el estado de menor energía en el arreglo de puntos cuánticos interactuantes desacoplado de los contactos ($V = 0$), es un estado de tres partículas ($n_e = 3$) con spin total $S = 1/2$ (doblete).

Si ahora “encendemos” lentamente el parámetro V , de tal forma que sea pequeño con respecto a la separación de niveles en el arreglo de puntos cuánticos, el término H_{mix} puede ser eliminado mediante una transformación canónica tipo Schrieffer-Wolff [15], y el modelo puede ser mapeado a un problema de una sola impureza de Kondo, cuyas propiedades están bien entendidas. Esta forma de proceder ha sido utilizada, por ejemplo, en trabajos teóricos [112] para describir la variación de T_K observada mediante STM en trímeros formados por átomos de Cr depositados en superficies de Au(111) [113] al cambiar la geometría de los trímeros.

Sin embargo, en el caso de los 3 puntos cuánticos, a diferencia del caso de los trímeros de Cr, la carga puede variar a medida que se modifica V_g . De esta manera, el estado de menor energía en los subespacios con $n_e = 2$ o $n_e = 4$ electrones puede acercarse al estado de mínima energía de $n_e = 3$, invalidando el método de la transformación canónica de Schrieffer-Wolff.

Para estudiar este problema, se realizó un mapeo a un único sitio efectivo que contiene la información completa del arreglo de puntos cuánticos desacoplados de los contactos ($V = 0$). Para ello, se diagonaliza el hamiltoniano H_d en los subespacios con n partículas. Los autoestados de H_d se clasifican entonces según el número de partículas n , su paridad ($\nu = \pm$), su spin total S y la proyección de S_z . Utilizamos la notación $|\psi_{j,p}^{(n)}\rangle$ para los autoestados de H_d en el subespacio n . El índice j numera al estado en orden creciente de energía y p es un índice que resume varios números cuánticos (paridad del estado, spin total y proyección de S_z). Las energías de estos niveles se escriben análogamente como $E_{j,p}^{(n)}$.

Esta base de estados nos permite representar el problema exactamente. Para ver esto más claramente, podemos insertar la identidad

$$\mathbf{1} = \sum_{n,j,p} \left| \psi_{j,p}^{(n)} \right\rangle \left\langle \psi_{j,p}^{(n)} \right|, \quad (4.15)$$

a izquierda y derecha del hamiltoniano H_d de la Ec. (4.7), con lo que, por construcción, éste queda diagonalizado en la forma

$$H_d = \sum_{n,j,p} E_{j,p}^{(n)} \left| \psi_{j,p}^{(n)} \right\rangle \left\langle \psi_{j,p}^{(n)} \right|. \quad (4.16)$$

En forma análoga, pueden insertarse identidades a izquierda y derecha del término H_{mix} de la Ec. (4.8). Dado que éste es un término de un cuerpo (un electrón en los contactos se destruye y se crea otro en el arreglo de puntos cuánticos o viceversa), los subespacios con n partículas se vinculan sólo con los de $n+1$ y $n-1$. La forma de H_{mix} en esta representación es

$$H_{mix} = V \left[\sum_{\sigma,\nu} \sum_{n,j,j',p,p'} \left\langle \psi_{j,p}^{(n)} \left| c_{1,\nu,\sigma}^\dagger \right| \psi_{j',p'}^{(n-1)} \right\rangle \left(c_{2,\nu,\sigma} \left| \psi_{j,p}^{(n)} \right\rangle \left\langle \psi_{j',p'}^{(n-1)} \right| \right) + \text{H.c.} \right], \quad (4.17)$$

donde $\langle \psi_{j,p}^{(n)} | c_{1,\nu,\sigma}^\dagger | \psi_{j',p'}^{(n-1)} \rangle$ es un elemento de matriz que da cuenta del peso del estado $|\psi_{j',p'}^{(n-1)}\rangle$ en el estado $|\psi_{j,p}^{(n)}\rangle$ cuando se agrega un electrón en el sitio $(1, \nu)$ del arreglo. Dado que no hay componentes de H_d en H_c , el término que describe los contactos, la forma de H_c no cambia con esta representación.

Esta representación es útil para realizar aproximaciones sistemáticas que describan la física de muy baja energía del sistema completo, basándose en un truncamiento conveniente del espacio de Hilbert completo generado por la base de autoestados de H_d , eliminando los estados de alta energía.

Nos concentraremos en zonas del espacio de parámetros tales que las fluctuaciones de carga más importantes sean aquellas entre los subespacios $n_e = 2, 3$ y 4 . Por esta razón, eliminamos de la descripción los estados con n diferente a estos valores (en el caso del hamiltoniano de la Ec. (4.5), esto equivale a eliminar los subespacios con $n=0, 1, 5$ y 6). De los subespacios con $n=2$ y 4 , sólo vamos a retener los singletes ($S=0$), dado que son los de menor energía¹. Con respecto al subespacio $n_e = 3$, retendremos sólo el fundamental que, en el caso del arreglo lineal de $N_d = 3$, pertenece a un subespacio con paridad impar ($\nu = -$) y $S = 1/2$. Claramente, la aproximación de retener sólo el estado fundamental de 3 partículas será válida para valores de V pequeños en relación a la diferencia de energía con los estados excitados. Desde el punto de vista de la teoría de perturbaciones en el parámetro V , los estados excitados del subespacio de 3 partículas contribuyen recién a un orden $\mathcal{O}(V)^4$ en el estado fundamental total del sistema conectado a los contactos (ver Fig. 4.2). La validez de esta aproximación será analizada en detalle más adelante en la Sec. 4.5.

¹Los estados triplete $S = 1$ tienen una energía que es mayor en $\sim t^2/U$

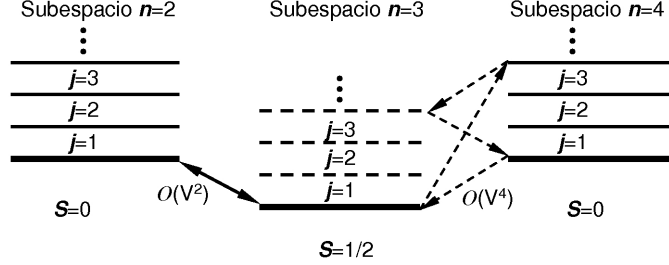


Figura 4.2: Esquema de los subespacios más relevantes incluidos en el modelo. Las fluctuaciones de carga que incluyen estados excitados de 3 partículas no se consideran en el modelo.

El modelo efectivo que se obtiene con este truncamiento de los autoestados de alta energía describe fluctuaciones de carga que se producen entre estados con $S = 0$ (subespacios $n_e = 2, 4$) y $S = 1/2$ (subespacio $n_e = 3$). Este hecho permite mapear el problema a un modelo *efectivo* de impureza de Anderson, puesto que los estados con $n_e = 2$ y 4 pueden representarse por los estados vacío y doblemente ocupado, respectivamente, del modelo de Anderson; y dado que el estado fundamental con $n_e = 3$ es un doblete ($S = 1/2$), puede ser representado por el estado simplemente ocupado. Es crucial que la representación respete la simetría $SU(2)$ original de los estados para poder describir correctamente la física de baja energía.

Para tratar el problema de muchos cuerpos, se introdujo una representación de bosones esclavos de Kotliar y Ruckenstein [95] (véase Sec. 3.2.4). Como ya se explicó anteriormente, esta representación consiste en incorporar a la descripción ciertos operadores bosónicos, sujetos a una condición de vínculo. En este caso, vamos a generalizar la descripción de la Sec. 3.2.4 para incorporar tantos bosones como estados se deseen mapear. Concretamente, el mapeo propuesto es

$$|\psi_{j,\nu}^{(2)}\rangle \rightarrow e_{j,\nu}^\dagger |0\rangle, \quad (4.18)$$

$$|\psi_{0,\nu_0,\sigma}^{(3)}\rangle \rightarrow f_\sigma^\dagger g_\sigma^\dagger |0\rangle, \quad (4.19)$$

$$|\psi_{j,\nu}^{(4)}\rangle \rightarrow h_{j,\nu}^\dagger f_\uparrow^\dagger f_\downarrow^\dagger |0\rangle, \quad (4.20)$$

donde $e_{j,\nu}^\dagger, g_\sigma^\dagger$ y $h_{j,\nu}^\dagger$ son operadores de creación bosónicos y f_σ^\dagger es el operador de creación fermiónico. Para eliminar los estados que no corresponden a la física del problema, se imponen los vínculos

$$1 = \sum_{j,\nu} e_{j,\nu}^\dagger e_{j,\nu} + \sum_{\sigma} g_\sigma^\dagger g_\sigma + \sum_{j,\nu} h_{j,\nu}^\dagger h_{j,\nu}, \quad (4.21)$$

$$f_\sigma^\dagger f_\sigma = g_\sigma^\dagger g_\sigma + \sum_{j,\nu} h_{j,\nu}^\dagger h_{j,\nu} \quad (4.22)$$

El hamiltoniano en esta representación es

$$H = H_c + H_f + H_{mix} + H_{boson} + H_{constr}, \quad (4.23)$$

donde H_c es el mismo que antes, y H_f representa el fermión en el sitio efectivo

$$H_f = E^{(3)} \sum_{\sigma} f_{\sigma}^{\dagger} f_{\sigma}, \quad (4.24)$$

donde $E^{(3)} \equiv E_g^{(3)}$ es la energía del estado fundamental en el subespacio de 3 partículas. El término H_{mix} en esta representación es

$$H_{mix} = \sqrt{2}V \left\{ \sum_{\nu, \sigma} f_{\sigma}^{\dagger} c_{2,(\nu_0, \nu), \sigma} \left[g_{\sigma}^{\dagger} \left(\sum_j \alpha_{j, \nu} e_{j, \nu} \right) + \left(\sum_j \beta_{j, \nu} h_{j, \nu}^{\dagger} \right) g_{\sigma} \right] + \text{H.c.} \right\}, \quad (4.25)$$

donde ν_0 es la paridad del estado fundamental del subespacio $n_e = 3$, que en el caso del trímero lineal es impar ($\nu_0 = -$), y donde la notación (ν, ν_0) indica que la paridad final del operador $c_{(\nu, \nu_0), \sigma}$ o $c_{2,(\nu, \nu_0), \sigma}^{\dagger}$ es el producto de las paridades ν y ν_0 . Las constantes $\alpha_{j, \nu}$ y $\beta_{j, \nu}$ son básicamente los elementos de matriz que aparecen en la Ec. (4.17) y se definen como

$$\alpha_{j, \nu} \equiv \langle \psi_{j, \nu}^{(2)} | d_{1,(\nu, \nu_0), \sigma} | \psi_{0, \nu_0, \sigma}^{(3)} \rangle, \quad (4.26)$$

$$\beta_{j, \nu} \equiv -\langle \psi_{j, \nu}^{(4)} | d_{1,(\nu, \nu_0), \sigma}^{\dagger} | \psi_{0, \nu_0, \bar{\sigma}}^{(3)} \rangle, \quad (4.27)$$

donde el signo menos en la última definición se ha colocado para que estos elementos de matriz sean simétricos ante la transformación electrón-hueco

$$d_{i, \sigma}^{\dagger} \rightarrow (-1)^i d_{i, \sigma}. \quad (4.28)$$

La simetría de inversión del hamiltoniano con respecto al sitio $i = 0$ (Ec. (4.9)) se mantiene con esta representación de bosones esclavos absorbiendo la paridad del estado $|\psi_{0, \nu_0, \sigma}^{(3)}\rangle$ en el fermión f_{σ} o en el bosón g_{σ} al hacer el mapeo de las Ecs. (4.18)-(4.20).

Las energías diagonales de los bosones están contempladas en el término H_{boson}

$$H_{boson} = \sum_{j, \nu} E_{j, \nu}^{(2)} e_{j, \nu}^{\dagger} e_{j, \nu} + \sum_{j, \nu} \left[E_{j, \nu}^{(4)} - 2E^{(3)} \right] h_{j, \nu}^{\dagger} h_{j, \nu}. \quad (4.29)$$

La energía del boson g_{σ} se ha puesto igual a 0. La razón para sustraer $2E^{(3)}$ en el último término de la Ec. (4.29) es evidente cuando contamos la energía total de la configuración

$$\begin{aligned} P_0 H P_0 e_{j, \nu}^{\dagger} |0\rangle &= E_{j, \nu}^{(2)} e_{j, \nu}^{\dagger} |0\rangle, \\ P_1 H P_1 f_{\sigma}^{\dagger} s_{\sigma}^{\dagger} |0\rangle &= E^{(3)} f_{\sigma}^{\dagger} g_{\sigma}^{\dagger} |0\rangle, \\ P_2 H P_2 h_{j, \nu}^{\dagger} f_{\uparrow}^{\dagger} f_{\downarrow}^{\dagger} |0\rangle &= \left[(E_{j, \nu}^{(4)} - 2E^{(3)}) + 2E^{(3)} \right] h_{j, \nu}^{\dagger} f_{\uparrow}^{\dagger} f_{\downarrow}^{\dagger} |0\rangle, \end{aligned} \quad (4.30)$$

donde hemos usado los proyectores P_i sobre el subespacio con i fermiones. Además, como es usual en la representación de bosones esclavos, los vínculos se incorporan al hamiltoniano

en forma de multiplicadores de Lagrange, λ' y λ_σ , asociados a los vínculos de las ecuaciones (4.21) y Eq. (4.22)

$$H_{constr} = \lambda' \left(\sum_{j,\nu} e_{j,\nu}^\dagger e_{j,\nu} + \sum_\sigma g_\sigma^\dagger g_\sigma + \sum_{j,\nu} h_{j,\nu}^\dagger h_{j,\nu} - 1 \right) + \sum_\sigma \lambda_\sigma \left(f_\sigma^\dagger f_\sigma - g_\sigma^\dagger g_\sigma - \sum_{j,\nu} h_{j,\nu}^\dagger h_{j,\nu} \right). \quad (4.31)$$

A continuación procedemos a realizar la aproximación de punto de ensilladura o campo medio. Debido a que nos concentraremos en el límite $U \rightarrow \infty$, vamos a prescindir de las raíces de Kotliar-Ruckenstein. Procediendo como en la Sec. 3.2.4, podemos expresar la diferencia en la energía libre a $T = 0$ al incorporar el arreglo de puntos cuánticos al sistema como

$$\Delta F_{fermion}|_{T=0} = - \sum_\sigma \frac{1}{\pi} \text{Im} \int_{-\infty}^0 \ln G_{ff,\sigma}(\omega) d\omega, \quad (4.32)$$

donde se ha colocado $E_F = 0$ y donde

$$G_{ff,\sigma}(\omega) = \lim_{\eta \rightarrow 0} \left[\omega + i\eta - E^{(3)} - \lambda_\sigma - \sum_\nu (|V_{\nu,\sigma}|^2 G_{22,\nu,\sigma}^0(\omega)) \right]^{-1}, \quad (4.33)$$

es la función de Green retardada del sitio efectivo, obtenida mediante ecuaciones de movimiento. El acoplamiento efectivo $V_{\nu,\sigma}$ se define como

$$V_{\nu,\sigma} \equiv \sqrt{2}V \left[g_\sigma^* \left(\sum_j \alpha_{j,\nu} e_{j,\nu} \right) + \left(\sum_j \beta_{j,\nu} h_{j,\nu}^* \right) g_{\bar{\sigma}} \right]. \quad (4.34)$$

La función de Green $G_{22,\nu,\sigma}^0(z)$ es el propagador no perturbado en los contactos, que se aproxima como

$$G_{22,\nu,\sigma}^0(\omega) \approx \rho_c \left[\ln \left| \frac{D + \omega}{D - \omega} \right| - i\pi\theta(D - |\omega|) \right], \quad (4.35)$$

donde la banda de conducción de semiancho D está descrita por una densidad de estados constante ρ_c . La expresión analítica exacta para $G_{22,\nu,\sigma}^0$ en el caso de las cadenas semi-infinitas correspondientes al término de la Ec.(4.6) es [64]

$$G_{22,\nu,\sigma}^{0,exacta}(\omega) = \frac{\omega \pm \sqrt{\omega^2 - 4t_c^2}}{2t_c^2}, \quad (4.36)$$

donde el signo $+$ ($-$) corresponde a $\omega < 0$ ($\omega > 0$). La aproximación de la Ec. (4.35) simplifica considerablemente el cálculo numérico. Por otro lado, constituye una buena aproximación

dado que nos concentraremos en el cálculo de las propiedades del sistema cerca de E_F . Comparando las Ecs. (4.35) y (4.36) se obtiene

$$\rho_c = \frac{1}{\pi t_c}. \quad (4.37)$$

Derivando la expresión para la energía libre (Ec. (4.32)) con respecto a los bosones condensados $e_{j,\nu}$, $h_{j,\nu}$, g_σ y los multiplicadores λ_σ y λ' se obtienen las correspondientes ecuaciones del punto de ensilladura (ver Apéndice B.2.2). La complejidad y número de estas ecuaciones puede reducirse drásticamente gracias a la eliminación de las raíces de Kotliar y Ruckenstein que reproducen el límite no interactuante. Esta eliminación permite vincular las ecuaciones que surgen de derivar la Ec. (4.32) de manera lineal, pudiendo expresarse finalmente todos los bosones en términos de los bosones $e_{\pm,0}$ y de los multiplicadores λ_σ y λ' de la forma

$$e_{j,\nu} = R_{j,\nu}^{(2)} e_{0,\nu}, \quad (4.38)$$

$$h_{j,\nu} = R_{j,\nu}^{(4)} e_{0,\nu}, \quad (4.39)$$

donde hemos definido

$$R_{j,\nu}^{(2)} \equiv \frac{\alpha_{j,\nu}}{\alpha_{0,\nu}} \left(\frac{E_{0,\nu}^{(2)} + \lambda'}{E_{j,\nu}^{(2)} + \lambda'} \right), \quad (4.40)$$

$$R_{j,\nu}^{(4)} \equiv \frac{\alpha_{j,\nu}}{\alpha_{0,\nu}} \left(\frac{E_{0,\nu}^{(2)} + \lambda'}{E_{j,\nu}^{(4)} + \lambda' - 2E^{(3)} - 2\lambda} \right). \quad (4.41)$$

En el Apéndice B.2.2 se muestra detalladamente esta derivación y la forma de las ecuaciones del campo medio.

4.3 Cálculo de la conductancia

El método de bosones esclavos en la aproximación de punto de ensilladura resuelve el problema de muchos cuerpos en términos de un problema de cuasipartículas no interactuantes, con parámetros efectivos renormalizados. Para calcular la conductancia, utilizamos entonces la fórmula de Landauer (que es válida sólo en sistemas no interactuantes) para el caso usual de transporte a través de dos terminales [114, 115]

$$G = \frac{e^2}{h} \int d\omega \left(-\frac{\partial f(\omega)}{\partial \omega} \right) \text{Tr} \left[\mathbf{t}^\dagger(\omega) \mathbf{t}(\omega) \right], \quad (4.42)$$

donde $\mathbf{t}(\omega)$ es la transmitancia a través del sitio efectivo. En su forma más general, la matriz de $\mathbf{t}(\omega)$ es [115]

$$[\mathbf{t}(\omega)]_{\alpha,\alpha'} = 2\pi \sum_{n,m} \sqrt{\rho_\alpha \rho_{\alpha'}} \bar{V}_{\alpha,n} \mathcal{G}_{n,m}^r V_{\alpha',m}, \quad (4.43)$$

donde los índices α y α' enumeran los canales (spin u otros números cuánticos necesarios para definir los estados del problema) en el contacto de la izquierda y derecha, respectivamente. Las cantidades ρ_α y $\rho_{\alpha'}$ son las densidades de estados para cada canal en los contactos y las matrices $V_{\alpha,n}$ representan los acoplamientos entre el canal α de los contactos con el sitio n del arreglo. $\mathcal{G}_{n,m}^r$ es la función de Green retardada, que en la notación de Zubarev es $\mathcal{G}_{n,m}^r \equiv \langle\langle c_n; c_m^\dagger \rangle\rangle_r$. Especificando para nuestro caso, utilizando el mapeo a un sitio efectivo y truncando el subespacio $n_e = 3$ reteniendo sólo el estado fundamental, la transmitancia es simplemente

$$\begin{aligned} [\mathbf{t}(\omega)]_{\sigma,\sigma} &= \pi\rho_c (V_{-2}V_2) G_{ff,\sigma}(\omega) \\ &= 2\pi\rho_c (V_+^2 - V_-^2) G_{ff,\sigma}(\omega), \end{aligned} \quad (4.44)$$

donde $V_{\pm 2} = (V_+ \pm V_-) / \sqrt{2}$ es el acoplamiento efectivo con el sitio ± 2 . A $T = 0$, la conductancia está dada por

$$G = \frac{2e^2}{h} [2\pi\rho_c (V_+^2 - V_-^2)]^2 |G_{ff,\sigma}|_{\omega=0}^2, \quad (4.45)$$

donde se usó la simetría de spin $G_{ff,\uparrow} = G_{ff,\downarrow}$. Esta expresión sugiere una interferencia destructiva entre canales con distinta paridad en la conductancia. Sin embargo, como se discutirá más adelante, el truncamiento realizado obliga a que los bosones e_{0+} y e_{0-} no puedan coexistir simultáneamente. Por ello, en nuestro caso no existen canales que interfieran destructivamente en la conductancia.

4.4 Resultados

4.4.1 Conductancia a través de 1 punto cuántico

Discutimos primero los resultados para la conductancia a través de un único punto cuántico. Dado que este problema ha sido ya muy estudiado, podemos utilizar esto para poder comparar el modelo y las aproximaciones realizadas con resultados muy precisos obtenidos mediante Grupo de Renormalización Numérico [116] para diferentes valores de $\Gamma = \pi\rho_c V^2$.

Los resultados obtenidos se muestran en la Fig. 4.3. La conductancia ideal para $E_d = -U/2$ indica la formación de un estado ligado virtual (resonancia de Kondo) a $T = 0$ que permite maximizar el valor de la conductancia [2, 3, 116]. Este es un resultado que aparece exclusivamente al incorporar las correlaciones en el sistema, ya que en estas condiciones (cerca de la condición de simetría electrón-hueco $E_d = -U/2$) los niveles del punto cuántico están muy alejados de E_F como para conducir por *tuneleo resonante*[53] a través de dichos niveles.

La simetría de inversión alrededor del punto $E_d = -U/2$ refleja la simetría electrón-hueco en el formalismo, que está obviamente contenida en las ecuaciones del campo medio. Un muy buen acuerdo se obtiene al comparar los resultados del método expuesto con los resultados de Grupo de Renormalización Numérico para $\Gamma/\pi U = 0.01$ (caso fuertemente interactuante). En este límite, el formalismo reproduce correctamente la dependencia exponencial del ancho efectivo $\tilde{\Gamma}$ de la resonancia en el nivel de Fermi de ρ_f (que cualitativamente se vincula con T_K),

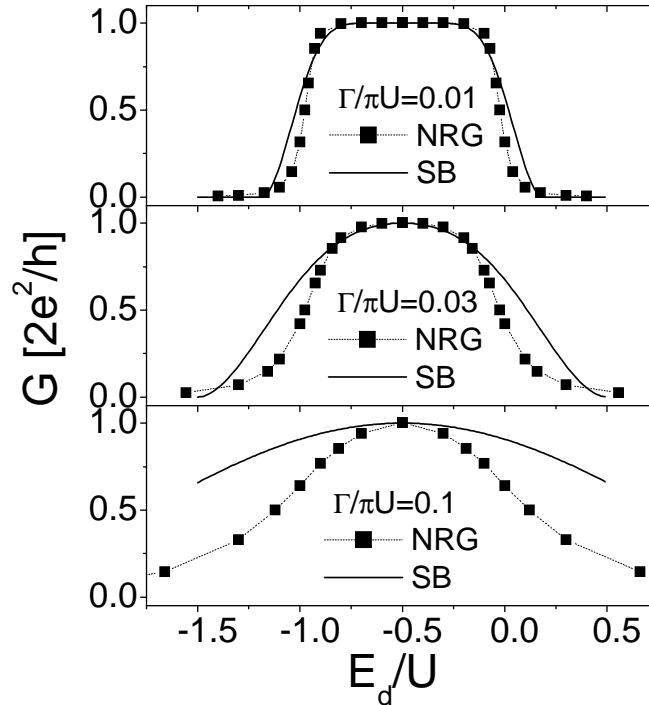


Figura 4.3: Conductancia en función de E_d/U , para varios valores de $\Gamma/\pi U$ [117]. Las líneas continuas indican los resultados del presente formalismo (SB) y los cuadrados (NRG) son cálculos obtenidos mediante Grupo de Renormalización Numérico (ver Ref. [116])

con el parámetro $\Gamma/\pi U$ (ver Apéndice B.2). Sin embargo, la forma funcional de la resonancia es lorentziana, mientras que el resultado correcto obtenido con Grupo de Renormalización Numérico en el régimen de Kondo es [118]

$$\rho_{d,\sigma} = \frac{1}{\pi\Gamma} \text{Re} \sqrt{(\omega + i\tilde{\Gamma})/i\tilde{\Gamma}}, \quad (4.46)$$

donde $\tilde{\Gamma} \approx 1.55 T_K$.

El acuerdo entre los resultados del método presentado y del Grupo de Renormalización Numérico se deteriora a medida que aumenta el valor de $\Gamma/\pi U$, y se pierde totalmente en el límite no interactuante. El origen de esta discrepancia se encuentra en el hecho de haber despreciado las raíces de Kotliar y Ruckenstein en el hamiltoniano modelo de la Ec. (4.23).

Para el caso simple de la conductancia a través de un solo punto cuántico, la expresión de la conductancia puede ser escrita también como [115, 119]

$$G = \frac{2e^2}{h} \int d\omega \left(-\frac{\partial f}{\partial \omega} \right) \pi\Gamma \rho_{d,\sigma}(\omega). \quad (4.47)$$

A muy bajas temperaturas ($T \ll T_K$), el sistema es un líquido de Fermi, y verifica la regla de suma de Friedel. Para el caso en que V y ρ_c no dependen de la energía ω , la regla de suma

de Friedel toma la forma [37]

$$\rho_{d,\sigma} = \frac{\sin^2(\pi\langle n_{d,\sigma} \rangle)}{\pi\Gamma}, \quad (4.48)$$

dando una conductancia igual a

$$G = \frac{2e^2}{h} \sin^2(\pi\langle n_{d,\sigma} \rangle), \quad (4.49)$$

donde $\langle n_{d,\sigma} \rangle$ es la carga total por spin en el punto cuántico. Puede demostrarse (ver Apéndice B.2) que la aproximación de bosones esclavos en campo medio verifica la regla de suma de Friedel.

La disminución de la conductancia lejos de la situación de simetría electrón-hueco se produce debido a que a medida que el nivel $E_g^{(2)}$ se aproxima a $E_g^{(3)}$ (aumenta V_g , es decir, se descarga el sistema), la magnitud del bosón e_{0+} aumenta y la de g disminuye, la resonancia debe desplazarse hacia energías mayores para disminuir la ocupación n_f y esto provoca una disminución del valor de $|G_{ff}|$ en el nivel de Fermi con la consecuente disminución de la conductancia. Un análisis similar permite explicar la caída de la conductancia cuando se carga el sistema.

4.4.2 Conductancia a través de 3 puntos cuánticos

Trimero lineal

Los resultados para la conductancia a través de 3 puntos cuánticos en la aproximación de campo medio se muestran en la Fig. 4.4. Los resultados obtenidos para 1 punto cuántico, con los mismos parámetros, también se muestran en la figura como comparación. Cualitativamente, ambos resultados muestran las mismas características generales, como la simetría electrón-hueco alrededor de $E_d = -U/2$, y la conductancia ideal en ese punto debido a la formación del singlete Kondo. Sin embargo, la región de conductancia ideal se angosta en el caso de los 3 puntos cuánticos. Esto es debido a una mayor presencia de fluctuaciones de carga, producto de la mayor cercanía de los niveles de menor energía de los subespacios de $n_e = 2$ y $n_e = 4$ partículas. Otra diferencia con respecto al caso de 1 punto cuántico, es que cuando V_g es elegido de tal forma que el sistema está lejos del caso de simetría electrón-hueco, un nuevo efecto Kondo aparece cuando V_g es tal que el subespacio con $n_e = 1$ o $n_e = 5$ partículas es el fundamental. En particular, para $N_d = 2$ puntos cuánticos, resultados de Grupo de Renormalización Numérico [120] han predicho un *plateau* de conductancia ideal cuando hay $n_e = 1$ o $n_e = 3$ electrones en la zona interactuante.

Hemos constatado numéricamente que la regla de suma de Friedel, Ec. (4.49), se verifica. La situación es similar al caso de 1 punto cuántico en el sentido que a $T = 0$, el sistema es un líquido de Fermi local y muestra conductancia ideal para la situación de simetría electrón-hueco. Esto representa una discrepancia con los resultados obtenidos por Büsser *et al.* [109]. Calculando exactamente los autoestados en el cluster de puntos cuánticos y embebiendo el sistema mediante un método autoconsistente, estos autores obtienen una anulación de la conductancia para N_d impar en la situación de simetría electrón-hueco. Sin embargo, nuestros

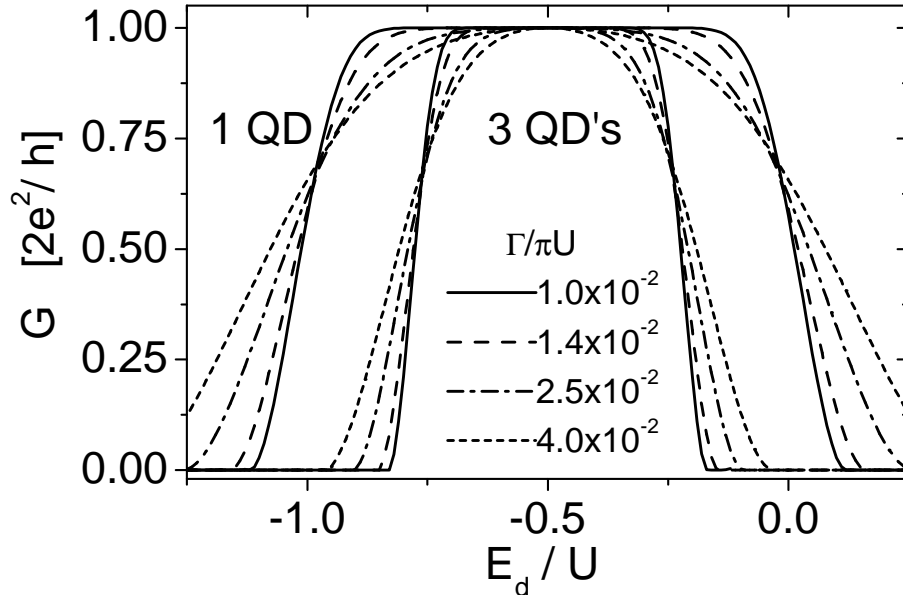


Figura 4.4: Conductancia a través de 1 y 3 puntos cuánticos (trímero lineal) en función de E_d/U , para varios valores de Γ [117].

resultados son consistentes con los de Oguri [110] que predicen un valor de conductancia ideal en ese caso.

Triángulo isósceles

En esta sección, consideramos un sistema con una geometría esquematizada en la Fig. 4.5. En esta figura, t' es un nuevo término de hopping que conecta los puntos cuánticos 1 y -1. El hamiltoniano modelo en este caso es

$$H'_d = H_d - t' \sum_{\sigma} d_{-1,\sigma}^{\dagger} d_{1,\sigma} + \text{H.c.} \quad (4.50)$$

donde H_d es el hamiltoniano de la Ec. 4.7 para el trímero lineal. Dado que este cambio sólo afecta al término H_d , la forma de proceder es exactamente igual a la de antes para el trímero lineal, pero cambiando $H_d \rightarrow H'_d$.

Cualitativamente, podemos pensar que el acoplamiento entre dos puntos cuánticos disminuye cuanto más lejos están uno de otro, y aumenta cuando se los coloca más cerca. Aunque esta imagen es útil para hacer una analogía geométrica simple de la situación física, en realidad experimentalmente los puntos cuánticos están fijos y los acoplamientos se varían modificando convenientemente voltajes de compuerta.

Un aspecto a tener en cuenta cuando $t' \neq 0$ es que se pierde la simetría electrón-hueco del hamiltoniano del trímero lineal (Ec. (4.5)). Esto se refleja en una pérdida de la simetría en los gráficos de la conductancia.

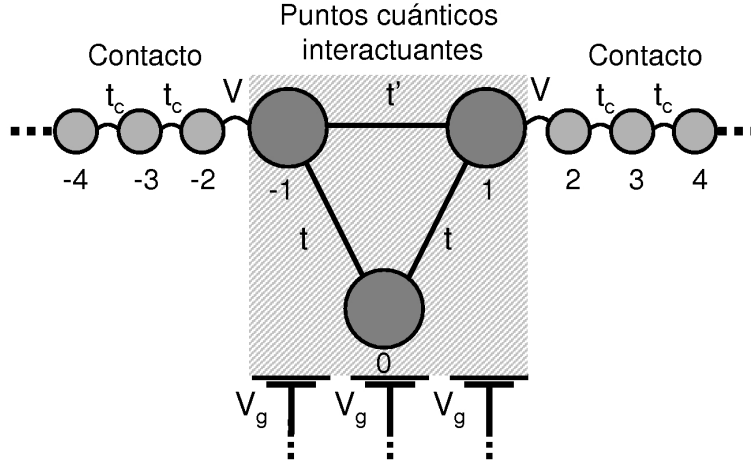


Figura 4.5: Esquema del arreglo triangular en la configuración isósceles.

Variando el valor de los parámetros t y t' , podemos pensar en distintas geometrías del trímero: triángulo equilátero ($t = t'$), isósceles ($t \neq t'$) y escaleno (todos los acoplamientos diferentes). De esta forma, el caso del trímero lineal anteriormente estudiado es un caso límite de triángulo isósceles con $t' = 0$.

En esta sección analizamos dos regímenes de parámetros para el caso del triángulo isósceles: $t' < t$ y $t' > t$. En el caso $t' = t$ (triángulo equilátero), el subespacio con $n_e = 3$ tiene un estado fundamental doblemente degenerado, con estados pertenecientes a subespacios con distinta paridad. Esto puede ser entendido cualitativamente recordando que el grupo de simetrías espaciales del triángulo equilátero en dos dimensiones (grupo C_{3v}) tiene una representación irreducible de dimensión dos. Como se verá más adelante, el método de bosones esclavos en campo medio no es válido en este punto del espacio de parámetros, dado que hemos asumido un estado fundamental doblete no degenerado. Experimentalmente, es muy difícil alcanzar un régimen de parámetros con tal simetría, por lo que no nos preocuparemos demasiado por el punto $t' = t$.

Aparte de este hecho, en términos generales se espera el desarrollo de un *plateau* en la conductancia, producto de la generación de la resonancia de Kondo en el nivel de Fermi, dado que el problema todavía puede mapearse en un modelo de Anderson efectivo.

En la Fig. 4.6 se muestran los resultados de la conductancia para el caso $t' < t$ y para parámetros $V = 0.45 t_c$, $t = 0.5 t_c$ y $U = t_c$, con lo cual el resultado $t' = 0$ es el caso del trímero lineal.

A medida que t' crece, las curvas se mueven aproximadamente en forma rígida hacia valores menores de E_d/U . En líneas generales, la pérdida de simetría en la figura se debe a la pérdida de la simetría electrón-hueco cuando $t' \neq 0$. El comportamiento particular de la conductancia puede ser entendido observando las propiedades del trímero aislado ($V = 0$). Con el objeto de comprender mejor este punto, se definen las siguientes funciones para el

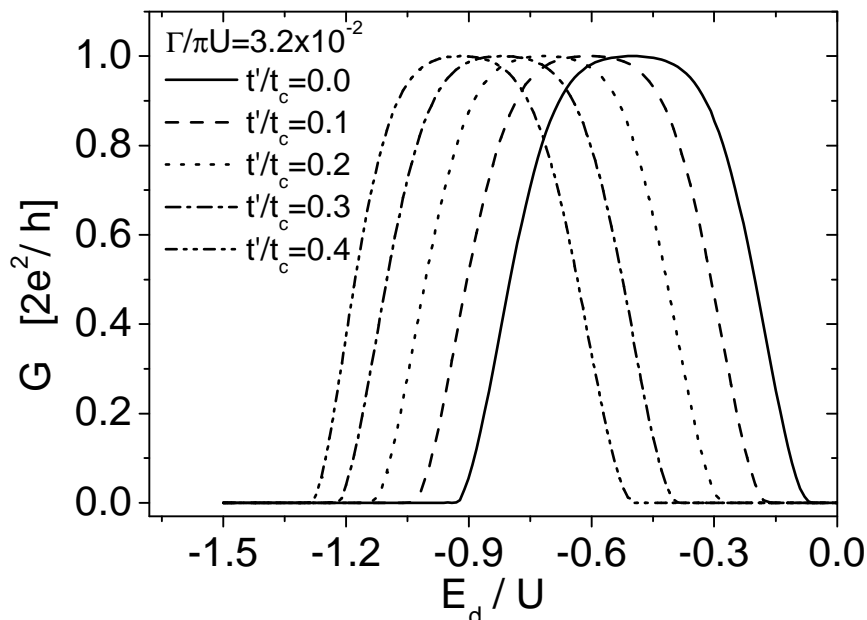


Figura 4.6: Conductancia a través de 3 puntos cuánticos en la configuración isósceles con $t' < t$, en función de E_d/U , para un valor de $\Gamma/\pi U = 3.2 \times 10^{-2}$ [117].

trímero aislado:

$$\begin{aligned}\Delta_{2,3}(E_d, t, t', U) &= E_g^{(2)}(E_d, t, t', U) - E_g^{(3)}(E_d, t, t', U), \\ \Delta_{4,3}(E_d, t, t', U) &= E_g^{(4)}(E_d, t, t', U) - E_g^{(3)}(E_d, t, t', U),\end{aligned}\quad (4.51)$$

que son las diferencias de energía entre los estados fundamentales de cada subespacio con diferente n . Fijando t, t' y U , definimos $E_d^{(2,3)}$ y $E_d^{(4,3)}$ como aquellos valores de E_d que verifican $\Delta_{2,3}(E_d^{(2,3)}, t, t', U) = 0$ y $\Delta_{4,3}(E_d^{(4,3)}, t, t', U) = 0$ respectivamente. Éstos corresponden aproximadamente a los valores a partir de los cuales las fluctuaciones de carga comienzan a ser relevantes cuando se conecta el cluster a los contactos. Desde el punto de vista de los regímenes del modelo de Anderson, corresponden a valores de E_d para los cuales el sistema se encuentra en la zona de valencia intermedia y el efecto Kondo empieza a desaparecer, y están relacionados con los valores de E_d a partir de los cuales la conductancia comienza a caer desde su valor ideal $2e^2/h$. En la Fig. 4.7 se muestra la evolución de los puntos $E_d^{(2,3)}$ y $E_d^{(4,3)}$ como función de t'/t_c . A partir de esta figura, las curvas de conductancia en la Fig. 4.6 se entienden fácilmente: los puntos E_d/U de la Fig. 4.6 donde, por ejemplo, la conductancia cae a la mitad del valor ideal ($G = G_0/2$), siguen la evolución de $E_d^{(2,3)}$ y $E_d^{(4,3)}$ de la Fig. 4.7.

En la Fig. 4.8 mostramos la conductancia para el caso $t' > t$. En este caso, las curvas se hacen más asimétricas a medida que se aumenta el parámetro t' y nuevamente, la gráfica puede entenderse observando primero el comportamiento del trímero aislado (Fig. 4.9).

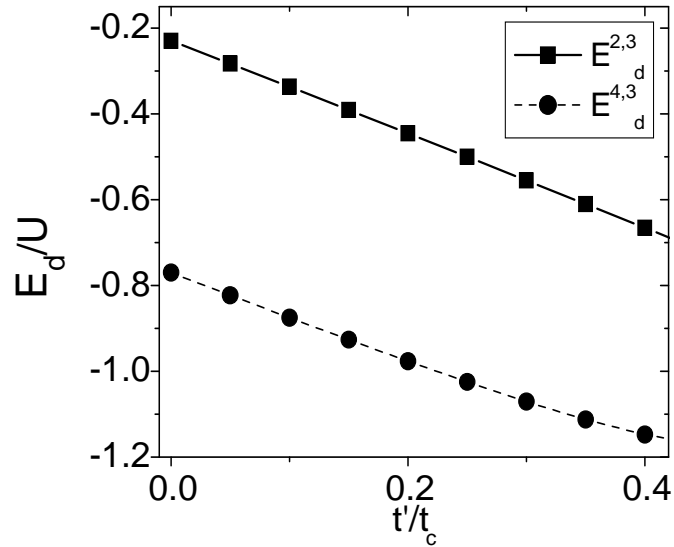


Figura 4.7: Evolución de $E_d^{(2,3)}/U$ y $E_d^{(4,3)}/U$ en función de t'/t_c para el triángulo isósceles $t' < t$. Este comportamiento permite explicar el desplazamiento casi rígido de las curvas de conductancia de la Fig. 4.6 [117].

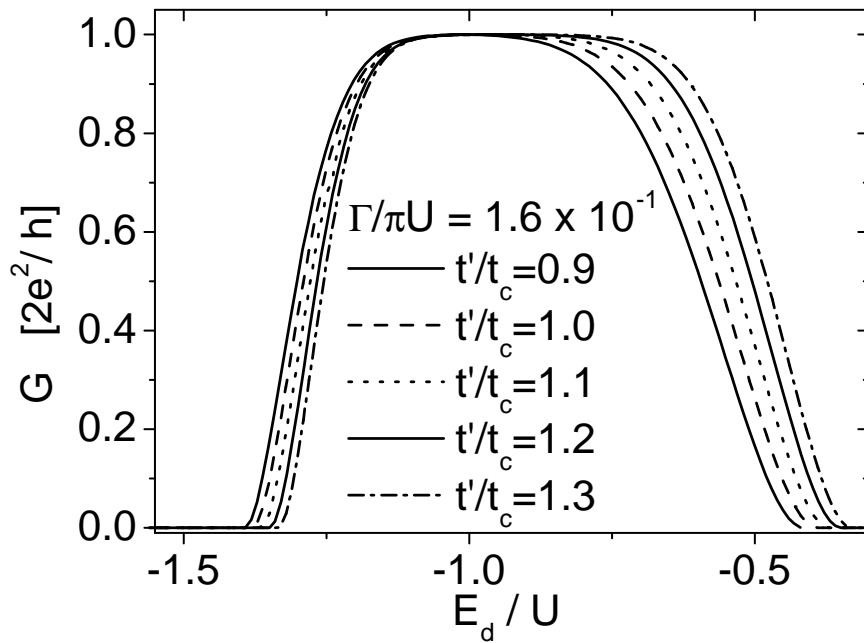


Figura 4.8: Conductancia a través de 3 puntos cuánticos en la configuración isósceles con $t' > t$, en función de E_d/U , para un valor de $\Gamma/\pi U = 1.6 \times 10^{-1}$ [117].

Cuando $t' > t$, la física de baja energía del sistema se aproxima a la de un singlete formado por los puntos cuánticos 1 y -1, débilmente acoplado a un doblete (un solo electrón en el

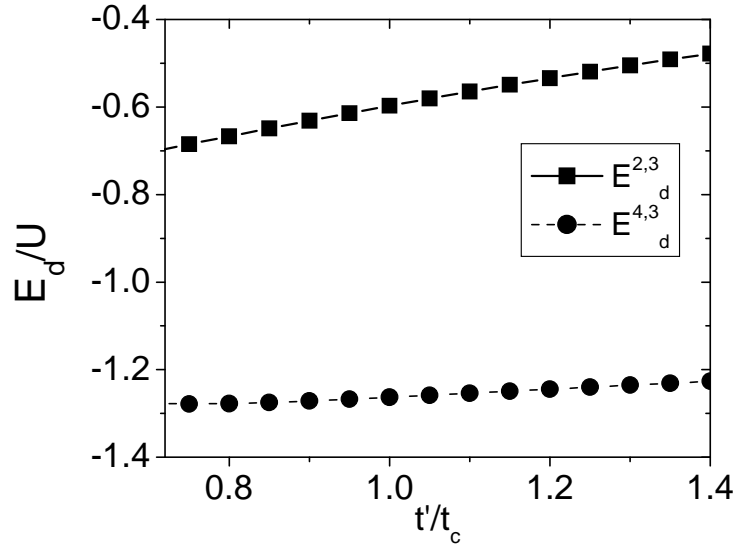


Figura 4.9: Evolución de $E_d^{(2,3)}/U$ y $E_d^{(4,3)}/U$ en función de t'/t_c para el triángulo isósceles $t' > t$. Este comportamiento permite explicar el desplazamiento casi rígido de las curvas de conductancia de la Fig. 4.8 [117].

punto cuántico 0) mediante el término t . En esta situación, el valor del elemento de matriz efectivo $V_{\nu,\sigma}$ de la Ec. (4.34) disminuye notablemente, lo que se refleja en una temperatura de Kondo mucho menor y en una drástica disminución de la rapidez de convergencia del método numérico para encontrar las raíces de las ecuaciones del campo medio. Por esta razón, para estos cálculos debimos utilizar un valor de V mayor ($V = t_c$), para obtener una temperatura de Kondo mayor y una convergencia más rápida. La validez del formalismo no se afecta demasiado por este hecho, a pesar de que V es comparable a las escalas de energía (t_c, U), dado que los valores altos de t' aseguran una diferencia de energías apreciables entre el estado fundamental y el primer excitado para $n_e = 3$. Por otro lado, la misma hibridización pequeña permite permanecer en la zona de validez del método.

4.5 Validez de la aproximación

El formalismo presentado en las secciones anteriores se basa en un mapeo a un sitio efectivo que posee, en principio, toda la información sobre el arreglo de puntos cuánticos interactuantes. Esto en principio es exacto, ya que se trata solamente de un cambio en la representación de los estados. La aproximación que se realiza es la de *truncar* el espacio de estados, reteniendo sólo los más relevantes para describir la física del sistema en un cierto rango de parámetros de interés.

La aproximación crucial en el caso del trímero consiste en considerar solamente el doblete fundamental en el subespacio $n_e = 3$. Esto es válido siempre que las contribuciones de los estados excitados de ese subespacio sea despreciable. La hibridización V induce un elemento de matriz efectivo de segundo orden, $M_{g \leftrightarrow e}^{eff}$ entre el doblete fundamental y los dobletes de mayor energía. Para el caso particular del trímero lineal, el doblete fundamental es impar

mientras que el primer excitado es un doblete par. En un contexto de teoría de perturbaciones en el elemento de matriz efectivo $M_{g \leftrightarrow e}^{eff}$, un criterio concreto de validez sería que

$$M_{g \leftrightarrow e}^{eff} \ll |E_e^{(3)} - E_g^{(3)}|, \quad (4.52)$$

donde

$$M_{g \leftrightarrow e}^{eff} = \sum_{j,\nu,n_e=2,4} \frac{1}{2} \left[\frac{\langle \psi_g^{(3)} | H_{mix} | \psi_{j,\nu}^{(n)} \rangle \langle \psi_{j,\nu}^{(n)} | H_{mix} | \psi_e^{(3)} \rangle}{E_{j,\nu}^{(n)} - E_g^{(3)}} + \frac{\langle \psi_e^{(3)} | H_{mix} | \psi_{j,\nu}^{(n)} \rangle \langle \psi_{j,\nu}^{(n)} | H_{mix} | \psi_g^{(3)} \rangle}{E_{j,\nu}^{(n)} - E_e^{(3)}} \right], \quad (4.53)$$

es el elemento de matriz efectivo entre el doblete fundamental $\psi_g^{(3)}$ y un doblete excitado $\psi_e^{(3)}$. Para estimar este elemento de matriz, en el caso del trímero lineal, por simplicidad, hemos restringido la suma a los singletes de menor energía de los subespacios con $n_e = 2, 4$ y solamente para el caso de simetría electrón-hueco. La expresión simplificada es

$$V^2 \alpha_{3g,2g} \overline{\alpha_{3e,2g}} \left(\frac{1}{E_g^{(2)} - E_g^{(3)}} + \frac{1}{E_g^{(2)} - E_e^{(3)}} \right) \ll |E_e^{(3)} - E_g^{(3)}|, \quad (4.54)$$

donde $\alpha_{a,b}$ es la generalización de las Ecs. (4.26) y (4.27) para cualquier par de estados $|a\rangle$ perteneciente al subespacio $n_e = 3$, y $|b\rangle$ perteneciente a $n_e = 2$. Para los parámetros utilizados en la Fig. 4.4 el valor más alto de $M_{g \leftrightarrow e}^{eff}/|E_e^{(3)} - E_g^{(3)}|$ es 0.16 para $\Gamma/\pi U = 4.0 \times 10^{-2}$. En el caso del triángulo isósceles, el criterio se tomó para el valor de V_g que induce $E_g^{(2)} = E_g^{(4)}$, dado que cuando $t' \neq 0$, se rompe la simetría electrón-hueco. Para los parámetros de la Fig. 4.6, el mayor valor de $M_{g \leftrightarrow e}^{eff}/|E_e^{(3)} - E_g^{(3)}|$ es 3.3×10^{-2} para $\Gamma/\pi U = 3.2 \times 10^{-2}$; y en la Fig. 4.8, el valor correspondiente de $M_{g \leftrightarrow e}^{eff}/|E_e^{(3)} - E_g^{(3)}|$ es 0.29 para $\Gamma/\pi U = 1.6 \times 10^{-1}$. Concluimos que estos valores son bastante consistentes con la aproximación.

Los detalles cuantitativos de estos resultados están también afectados por otras dos aproximaciones, relacionadas con el método de los bosones esclavos: a) El truncamiento de los estados triplete en los subespacios $n_e = 2$ y 4 y b) el hecho de que los bosones esclavos “eligen” la solución más conveniente dentro de los subespacios con paridad definida (o bien $e_{0,+} = h_{0,+} = 0$ o $e_{0,-} = h_{0,-} = 0$).

Con respecto a esto último, formalmente, ambos canales podrían existir si los vínculos bosónicos se cumpliesen exactamente en el hamiltoniano de la Ec. (4.25), ya que en el mapeo de las Ecs. (4.18)-(4.20), los operadores $e_{j,\nu}^\dagger, e_{j,\nu}$ y $h_{j,\nu}^\dagger, h_{j,\nu}$ retienen la paridad del estado del cual provienen, conservando la simetría de inversión respecto del sitio $i = 0$ (Ec. (4.9)). Sin embargo, al hacer la aproximación de campo medio, los operadores bosónicos se “condensan” y se transforman en números, que son invariantes respecto de la transformación de reflexión de la Ec. (4.9). Asignando, por ejemplo, la paridad del estado fundamental de $n_e = 3$ (ν_0)

al fermión f_σ , el hamiltoniano en la aproximación de campo medio está formado por dos bandas de electrones de conducción en los contactos con diferente paridad, que se mezclan simultáneamente con el sitio efectivo f mediante los elementos de matriz efectivos $V_{\nu,\sigma}$. De las Ecs. (B.69) puede verse que la única manera de satisfacer las ecuaciones del *saddle-point* (ver Apéndice B.2.2) es evitando el acoplamiento simultáneo de ambas bandas con paridad definida y forzando a que uno de los *hoppings* efectivos $V_{\nu,\sigma} = 0$, con lo cual $e_{0,\nu} = h_{0,\nu} = 0$. Dado que las ecuaciones del campo medio surgen de minimizar la energía global del sistema, éste “decide” cuál banda desacoplar en función de cuál le permite minimizar más su energía.

De todas maneras, estos detalles cuantitativos no alteran la conclusión general de esta sección, en el sentido de que para valores de V pequeños el sistema puede ser mapeado a un problema efectivo de una impureza de Anderson o de Kondo, y el estado fundamental es un líquido de Fermi a bajas temperaturas.

La posibilidad obtener un comportamiento tipo “*Non-Fermi Liquid*” para un trímero triangular con simetría C_{3v} ha sido discutida en otros trabajos [121, 122] utilizando Grupo de Renormalización Numérico y argumentos de escaleo, donde se ha encontrado que el punto fijo a $T = 0$ es un Non-Fermi Liquid inestable. Esto está relacionado con la degeneración orbital en el estado fundamental. Nuestro método no permite acceder a ese régimen de alta simetría, dado que los bosones esclavos en campo medio siempre exploran un subespacio de soluciones tipo líquido de Fermi, que es estable cuando el doblete fundamental no está degenerado.

4.6 Resumen y conclusiones

Se estudió la conductancia a través de diferentes arreglos de puntos cuánticos interactuantes acoplados a contactos metálicos. Utilizando un mapeo a un sitio efectivo que describe las excitaciones de baja energía y una representación de bosones esclavos de Kotliar-Ruckenstein en la aproximación de punto de ensilladura, se obtuvo la conductancia a través del sistema utilizando la formulación de Landauer.

El método descrito en esta parte del trabajo permite describir las propiedades de transporte a través de sistemas nanoscópicos fuertemente correlacionados cerca de la energía de Fermi y a temperaturas bajas, siempre que el acoplamiento con los contactos (parámetro V) sea pequeño con respecto a la diferencia de niveles en el cluster de puntos cuánticos.

Los resultados obtenidos muestran claramente que la aproximación de un sitio efectivo, es consistente con la descripción de líquido de Fermi local de la Ref. [110]. Cuando los valores de V_g son tales que se induce un número impar de electrones en el arreglo de puntos cuánticos, la formación de un estado ligado virtual en el nivel de Fermi, permite obtener valores de conductancia muy cercanos al cuanto de conductancia $2e^2/h$.

Una fuente de interferencias destructivas en la conductancia, que no está contemplada en la aproximación de campo medio utilizada en esta parte del trabajo, podría ser la coexistencia de canales con diferente paridad. Sin embargo, esta interferencia debería ser pequeña para valores de V pequeños. Este condicionamiento no es demasiado restrictivo, ya que experimentalmente los acoplamientos con los contactos pueden hacerse efectivamente débiles. El truncamiento de estados de 2 y 4 partículas con $S = 1$ es también una fuente de error en la descripción, ya que algunos de ellos compiten energéticamente con estados con $S = 0$.

Intuitivamente se puede argumentar que la incorporación de estos estados produce una disminución de la temperatura de Kondo [112]. Una representación de bosones esclavos que intente incorporar estos estados, debería respetar la simetría $SU(2)$ de los bosones con $S = 1$, pero esto es no trivial en la aproximación de punto de ensilladura.

Los resultados de este capítulo están publicados en la Ref. [117].

Capítulo 5

Efectos de interferencia en anillos de Hubbard

5.1 Introducción

El avance en la nanofabricación basada en semiconductores ha permitido no solamente el desarrollo de nuevos dispositivos con potenciales usos tecnológicos, sino también construir herramientas para verificar los conceptos más fundamentales de la mecánica cuántica. Algunos de estos conceptos, el principio de superposición, la interferencia cuántica y la existencia de fases topológicas, han sido verificados en forma bella e impresionante en estudios experimentales de los llamados efectos *Aharonov-Bohm* [123]¹ y *Aharonov-Casher* [124, 125] en anillos mesoscópicos [126], y en anillos mesoscópicos con puntos cuánticos [127, 128].

Una fase topológica aparece en la función de onda de un sistema cuántico al completar una trayectoria cerrada en el espacio de parámetros del hamiltoniano [129]. Cuando este movimiento es adiabático, la fase acumulada se denomina *fase de Berry* [129], y la extensión a un caso más general se denomina *fase de Aharonov-Anandan* [130].

En el caso de electrones que atraviesan un anillo unidimensional conectado a dos contactos metálicos y concatenado por un flujo magnético $\phi = \pi r^2 B$, donde r es el radio del anillo y B es un campo magnético uniforme, la parte de la función de onda del electrón que circula por la mitad superior del anillo adquiere una fase proporcional a $\int_{C^+} \vec{A}(\vec{r}) \cdot d\vec{l}$, donde $\vec{A}(\vec{r})$ es el potencial vector, que verifica $\vec{\nabla} \times \vec{A}(\vec{r}) = \vec{B}$, mientras que la parte inferior acumula una fase $\int_{C^-} \vec{A}(\vec{r}) \cdot d\vec{l}$, de manera tal que al recombinarse ambas partes en el extremo de salida del anillo, la fase relativa acumulada es la fase de Aharonov-Bohm $\Phi_{AB} = \oint \vec{A}(\vec{r}) \cdot d\vec{l}$. La fase Aharonov-Bohm es un ejemplo de fase topológica. Su presencia permite generar notables modulaciones en la conductancia a través de estos anillos [126].

Otro ejemplo de fase topológica es la fase Aharonov-Casher $\Phi_{AC,\sigma}$, que se origina debido

¹En realidad, los experimentos realizados en anillos mesoscópicos no constituyen verdaderamente una demostración de la predicción original de Y. Aharonov y D. Bohm (ver Ref. [123]). Ésta predice que un electrón acumula una fase topológica al atravesar una zona en la que el campo magnético es nulo, mientras que los experimentos realizados no satisfacen este requisito [53]. De cualquier manera, esto no les quita su importancia en la demostración de efectos de interferencia cuántica.

a la presencia de la interacción spin-órbita de Rashba, que resulta del movimiento del spin del electrón en una zona donde el campo eléctrico es no nulo. En general, en las heteroestructuras semiconductoras, los campos eléctricos se originan naturalmente al yuxtaponer dos materiales con distinto *gap*. Ubicando contactos de compuerta en forma conveniente, estos campos eléctricos pueden regularse de manera controlada, modificando a su vez el valor de la interacción spin-órbita. La fase relativa acumulada por los electrones que atraviesan el anillo en sentido horario o antihorario con una cierta proyección de spin, también puede producir modulaciones en la conductancia apreciables [124, 125].

Aunque mucha de la fenomenología observada en estos experimentos puede ser explicada mediante modelos de electrones no interactuantes [131, 132, 133], la inclusión de los efectos de las correlaciones en estos sistemas es en general difícil y no existe aún un esquema consensuado. Aún con el conocimiento de los autoestados exactos de la región interactuante desacoplada del resto del sistema no interactuante (típicamente los contactos), no existe un procedimiento sencillo para calcular la conductancia. Una simplificación existe en el límite en que el acoplamiento del sistema con los contactos es muy pequeño, $V \rightarrow 0$. Algunos autores [134, 135, 136] usaron un método perturbativo a orden V^2 , válido si el estado fundamental del sistema interactuante es no degenerado. Esto, por supuesto, no es válido en el régimen de Kondo, ya que el estado fundamental es doblemente degenerado ².

Además del valor intrínseco que supone el entendimiento básico de las correlaciones en la conductancia a través de estos sistemas, estos dispositivos están siendo estudiados también por sus posibles usos como interferómetros, interruptores, etc. que permitan medir y controlar los grados de libertad de spin, lo que constituye el objetivo de la *espintrónica*.

En esta parte del trabajo nos concentraremos en estudiar el efecto de las correlaciones en la conductancia a través de arreglos de puntos cuánticos en presencia de los efectos Aharonov-Bohm y Aharonov-Casher. En las Secs. 5.2 y 5.3 se presenta el desarrollo de un modelo “*tight-binding*” para un anillo de Hubbard unidimensional, en presencia de los efectos de la interacción spin-órbita, y las aproximaciones realizadas. En la Sec. 5.4 se presenta el cálculo de la conductancia, y en la Sec. 5.5 se muestran los resultados obtenidos y comparaciones con otros formalismos. Finalmente, en la Sec. 5.6 se muestra un resumen y las conclusiones de este capítulo.

5.2 Modelo “*tight-binding*” para un anillo no interactuante

Para comenzar nuestro estudio, el primer paso es derivar un modelo “*tight-binding*” no interactuante, para luego incorporar correlaciones locales. El hamiltoniano de un electrón en un gas bidimensional, con un campo magnético \vec{B} aplicado y sujeto a la interacción spin-órbita es (despreciando el efecto Zeeman) [132]

$$H_{SO} = \frac{\vec{\Pi}^2}{2m_e^*} + \alpha'_{SO} \vec{\sigma} \cdot (\vec{E} \times \vec{\Pi}) + V(\vec{r}), \quad (5.1)$$

donde el momento canónico $\vec{\Pi} = \vec{p} - e\vec{A}$ contiene al potencial vector, y donde α'_{SO} es la constante de interacción spin-órbita de Rashba. En nuestro caso, suponemos los campos \vec{B}

²Se supone un campo B lo suficientemente pequeño como para despreciar el efecto Zeeman.

y \vec{E} uniformes y aplicados en la dirección perpendicular al plano del anillo. El término $V(\vec{r})$ representa, en este caso, un potencial electrostático que confina el movimiento 2D del electrón a un anillo de ancho w . La derivación del límite correcto 2D \rightarrow 1D (es decir, el límite $w \rightarrow 0$) a partir de este hamiltoniano fue logrado recientemente [137]. Una versión compacta de este hamiltoniano 1D en coordenadas cilíndricas es [131]

$$H_{NI} = \hbar\Omega \left(-i\frac{\partial}{\partial\varphi} - \frac{\phi}{\phi_0} + \frac{\omega_{so}}{2\Omega}\sigma_r(\varphi) \right)^2, \quad (5.2)$$

donde $\Omega = \hbar/2m_e^*r^2$, con m_e^* la masa efectiva del electrón en el semiconductor, y $\omega_{SO} = \alpha_{SO}/\hbar r$ con $\alpha_{SO} = \hbar\alpha'_{SO}E_z$. El flujo magnético es $\phi = B\pi r^2$ y el cuanto de flujo $\phi_0 = h/e$. Las matrices de Pauli están escritas en coordenadas cilíndricas

$$\sigma_r(\varphi) = \sigma_x \cos \varphi + \sigma_y \sin \varphi, \quad (5.3)$$

$$\sigma_\varphi(\varphi) = -\sigma_x \sin \varphi + \sigma_y \cos \varphi. \quad (5.4)$$

Una cosa interesante de esta notación es que se verifica $\partial\sigma_r(\varphi)/\partial\varphi = \sigma_\varphi(\varphi)$. Para simplificar el problema, en la Ec. (5.2) se ha despreciado el término Zeeman frente a los efectos orbitales y de spin-órbita. Este hamiltoniano puede ser diagonalizado muy fácilmente como se demuestra en la Ref. [131] con autovalores y autovectores

$$E_n^{(\sigma)} = \hbar\Omega \left(n - \frac{\Phi_{AB} + \Phi_{AC,\sigma}}{2\pi} \right)^2, \quad (5.5)$$

$$\Psi_n^{(\sigma)}(\varphi) = e^{in\varphi} \chi_n^{(\sigma)}(\varphi). \quad (5.6)$$

donde los espinores ortogonales $\chi_n^{(\sigma)}(\varphi)$, expresados en la base de S_z , son

$$\chi_n^{(\uparrow)}(\varphi) = \begin{pmatrix} \cos \theta/2 \\ e^{i\varphi} \sin \theta/2 \end{pmatrix}, \quad (5.7)$$

$$\chi_n^{(\downarrow)}(\varphi) = \begin{pmatrix} \sin \theta/2 \\ -e^{i\varphi} \cos \theta/2 \end{pmatrix}. \quad (5.8)$$

En lugar de utilizar esta base para intentar derivar un modelo *tight-binding*, podemos absorber el segundo y tercer término del hamiltoniano en las funciones de onda mediante una transformación de gauge conveniente, representada mediante el operador unitario \hat{U} , de tal manera que verifique la relación

$$-i\frac{\partial}{\partial\varphi}\hat{U}(\varphi) = \left(-\frac{\phi}{\phi_0} + \frac{\omega_{so}}{2\Omega}\sigma_r(\varphi) \right) \hat{U}(\varphi). \quad (5.9)$$

De esta manera, se verifica

$$H_{NI}\psi_\sigma = E\psi_\sigma \rightarrow H'_{NI}\psi'_\sigma = E\psi'_\sigma, \quad (5.10)$$

con $H'_{NI} = \hat{U}^\dagger H_{NI} \hat{U} = \hbar\Omega \left(-i\frac{\partial}{\partial\varphi} \right)^2$, donde el flujo magnético y la interacción Rashba han desaparecido, y donde $\psi'_\sigma = \hat{U}^\dagger \psi_\sigma$ es el espinor transformado. En el Apéndice C se demuestra

que la transformación unitaria buscada es

$$\hat{U}(\varphi) = \exp\left[-i\sigma_z \frac{\varphi}{2}\right] \exp\left[i\vec{\sigma} \cdot \vec{n}_\theta \frac{\varphi'}{2}\right] \exp\left[i\frac{\phi}{\phi_0}\varphi\right], \quad (5.11)$$

donde $\vec{n}_\theta = (-\sin\theta, 0, \cos\theta)$ y $\theta = \tan^{-1}(\omega_{SO}/\Omega)$, y donde $\varphi' = \varphi\sqrt{1 + (\omega_{SO}/\Omega)^2}$. Es fácil ver de la Ecs. (5.2) y (5.9) que $\chi_n^{(\sigma)}(\varphi) = \hat{U}(\varphi)\chi_n^{(\sigma)}(0)$.

Ahora estamos en condiciones de proponer un modelo *tight-binding* a primeros vecinos generalizado para incorporar los efectos Aharonov-Bohm y Aharonov-Casher. Supongamos un anillo con N_d sitios, con parámetro de red a , tal que $N_d a = 2\pi r$, y donde el sitio 0 está en la posición angular $\varphi = 0$. El modelo más general con simetría de traslación es [138]

$$H = t \sum_{j=0}^{N_d} \left(c_{i+1,\uparrow}^\dagger, c_{i+1,\downarrow}^\dagger \right) M_{i+1,i} \begin{pmatrix} c_{i,\uparrow} \\ c_{i,\downarrow} \end{pmatrix} + \text{H.c.}, \quad (5.12)$$

donde el operador $M_{i+1,i}$ es una matriz de 2×2 que en el caso general mezcla las componentes de los espinores escritos en la base de S_z (Ecs. (5.7) y (5.8)), y donde el elemento de matriz t , proveniente de las componentes orbitales de las funciones de onda, debe ser elegido como $t = \hbar\Omega \times (N_d/2\pi)^2 = \hbar^2/(2m_e^* r^2) \times (r/a)^2$ para reproducir el hamiltoniano de la Ec. (5.2) en el límite $N_d \rightarrow \infty$. Esta expresión surge de comparar las relaciones de dispersión entre los modelos continuo y *tight-binding* a vectores de onda k pequeños. Dado que no contiene ningún término que mezcle las proyecciones de spin, el hamiltoniano transformado $H'_{NI} = \hat{U}^\dagger H_{NI} \hat{U} = \hbar\Omega \left(-i\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)^2$, al ser escrito en la base transformada

$$\begin{pmatrix} c_{i,\uparrow} \\ c_{i,\downarrow} \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} d_{i,\uparrow} \\ d_{i,\downarrow} \end{pmatrix} = \hat{U}(\varphi_i) \begin{pmatrix} c_{i,\uparrow} \\ c_{i,\downarrow} \end{pmatrix}, \quad (5.13)$$

da origen a un hamiltoniano *tight-binding* tradicional, diagonal en la base de los nuevos espinores $d_{i,\sigma}$, lo que implica $\hat{U}(\varphi_{i+1})M_{i+1,i}\hat{U}^\dagger(\varphi_i) = \mathbf{1}$, donde $\varphi_i = 2\pi i/N_d$ es la posición angular discreta del punto cuántico i -ésimo. De aquí se sigue que

$$M_{i+1,i} = \hat{U}^\dagger(\varphi_{i+1})\hat{U}(\varphi_i). \quad (5.14)$$

La base de la Ec. (5.13) permite eliminar el operador $M_{i+1,i}$ que aparece en la Ec. (5.12) entre todos los sitios, excepto entre los sitios $N_d - 1$ y 0, donde se debe imponer la condición de contorno $c_{N_d,\sigma} = c_{0,\sigma}$. Utilizando la transformación de la Ec. (5.13) se obtiene la ecuación

$$\hat{U}(2\pi) \begin{pmatrix} d_{0,\uparrow} \\ d_{0,\downarrow} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} d_{N_d,\uparrow} \\ d_{N_d,\downarrow} \end{pmatrix} \quad (5.15)$$

Eligiendo la base de espinores de los sitios 0 (o N_d) en la dirección \vec{n}_θ , es posible diagonalizar el operador $\hat{U}(2\pi)$

$$\hat{U}(2\pi) \begin{pmatrix} d_{0,\uparrow} \\ d_{0,\downarrow} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_\uparrow d_{0,\uparrow} \\ a_\downarrow d_{0,\downarrow} \end{pmatrix} \quad (5.16)$$

donde los autovalores son $a_\sigma = e^{i(\Phi_{AB} + \Phi_{AC, \sigma})}$, y donde las fases

$$\Phi_{AB} = \frac{2\pi\phi}{\phi_0}, \quad (5.17)$$

$$\Phi_{AC, \sigma} = \sigma\pi \left[1 + \sqrt{1 + \left(\frac{N_d \alpha_{SO}}{2\pi t a} \right)^2} \right], \quad (5.18)$$

son las fases de Aharonov-Bohm y Aharonov-Casher respectivamente que adquiere un electrón con proyección de spin σ al completar una vuelta alrededor del anillo [131, 132]. Es decir, eligiendo esta base particular, el último *hopping* entre el sitio $N_d - 1$ y el sitio 0 es $t e^{i(\Phi_{AB} + \Phi_{AC, \sigma})}$. Finalmente, con una nueva transformación de gauge (esta vez trivial) para distribuir uniformemente las fases Aharonov-Bohm y Aharonov-Casher, el hamiltoniano *tight-binding* puede escribirse de manera muy simple como

$$H = \sum_{i=0, \sigma}^{N_d} t e^{i(\Phi_{AB} + \Phi_{AC, \sigma})/N_d} d_{i+1, \sigma}^\dagger d_{i, \sigma} + \text{H.c.}, \quad (5.19)$$

con condiciones periódicas de contorno.

La posibilidad de eliminar los términos de la interacción spin-órbita mediante una transformación unitaria apropiada había sido propuesta anteriormente [138], pero (hasta donde sabemos) nunca se había escrito la forma explícita de dicha transformación. Esto tiene importantes consecuencias, ya que en el límite termodinámico las condiciones de contorno son irrelevantes y las propiedades del sistema deberían ser idénticas a las de un modelo sin interacción spin-órbita. Por otro lado, este es un resultado exacto interesante ya que a partir de él pueden incorporarse fácilmente los efectos de correlaciones locales tipo Hubbard.

5.3 Modelo para un anillo interactuante

Para estudiar el efecto de las interacciones en un anillo formado por puntos cuánticos, nos vamos a focalizar en el caso $N_d = 4$, que se ilustra en la Fig. 5.1. El hamiltoniano completo del sistema es

$$H = H_c + H_r + H_{mix}, \quad (5.20)$$

$$H_c = \sum_{i=0, \sigma}^{-\infty} t_c c_{i-1, \sigma}^\dagger c_{i, \sigma} + \sum_{i=1, \sigma}^{\infty} t_c c_{i+1, \sigma}^\dagger c_{i, \sigma} + \text{H.c.}, \quad (5.21)$$

$$H_r = \sum_{i=0, \sigma}^{N_d} t e^{i(\Phi_{AB} + \Phi_{AC, \sigma})/N_d} d_{i+1, \sigma}^\dagger d_{i, \sigma} + \text{H.c.} + \sum_{i=0, \sigma}^{N_d} E_d d_{i, \sigma}^\dagger d_{i, \sigma} + U d_{i, \uparrow}^\dagger d_{i, \uparrow} d_{i, \downarrow}^\dagger d_{i, \downarrow}, \quad (5.22)$$

$$H_{mix} = V \sum_{\sigma} c_{0, \sigma}^\dagger d_{N_d/2, \sigma} + c_{1, \sigma}^\dagger d_{0, \sigma} + \text{H.c.}, \quad (5.23)$$

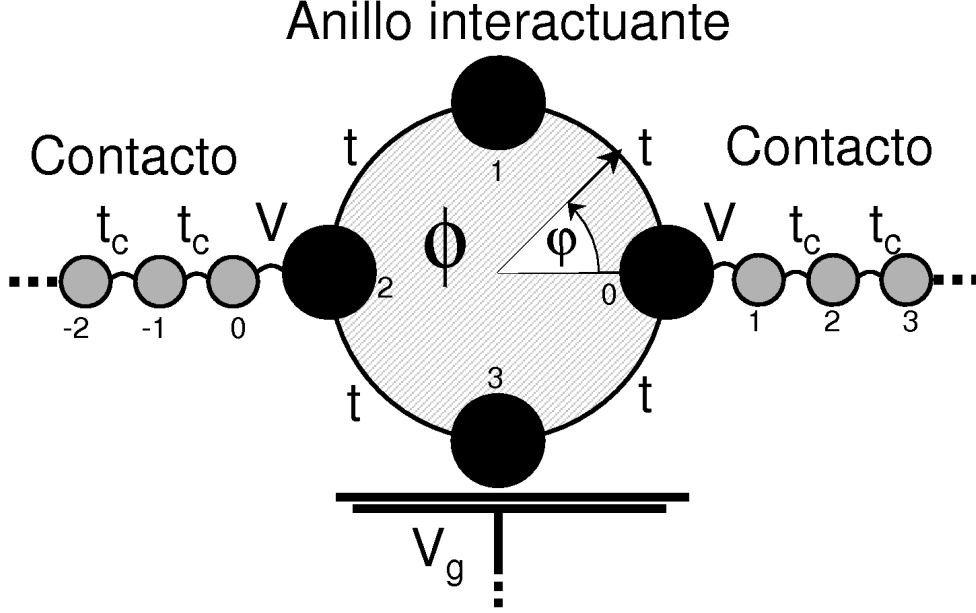


Figura 5.1: Esquema del sistema para $N_d = 4$ sitios.

donde H_c describe a los contactos no interactuantes, representado por cadenas semi-infinitas. El término H_r describe al anillo con correlaciones locales, tomando como base el modelo *tight-binding* descrito en la sección anterior. Suponemos, al igual que en el capítulo anterior, que la carga en cada punto cuántico puede variarse modificando la energía diagonal con un término adicional en el hamiltoniano $-V_g \sum_{i,\sigma} d_{i,\sigma}^\dagger d_{i,\sigma}$. Es claro que las correlaciones locales no son afectadas con la transformación unitaria de la Ec.(5.13), ya que

$$\begin{pmatrix} c_{i,\uparrow}^\dagger \\ c_{i,\downarrow}^\dagger \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} c_{i,\uparrow} \\ c_{i,\downarrow} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c_{i,\uparrow}^\dagger \\ c_{i,\downarrow}^\dagger \end{pmatrix} \hat{U}^\dagger(\varphi_i) \hat{U}(\varphi_i) \begin{pmatrix} c_{i,\uparrow} \\ c_{i,\downarrow} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} d_{i,\uparrow}^\dagger \\ d_{i,\downarrow}^\dagger \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} d_{i,\uparrow} \\ d_{i,\downarrow} \end{pmatrix}. \quad (5.24)$$

Finalmente, el término H_{mix} describe la conexión del anillo a los contactos. Para simplificar la notación del hamiltoniano, en el contacto de la izquierda se utilizó una base de espinores que coincide con la correspondiente al sitio $i = N_d/2$. Análogamente, para la cadena de la derecha, la base de los espinores es la del sitio $i = 0$.

5.3.1 Aproximaciones

Al igual que el capítulo anterior, vamos a tratar este problema mediante un mapeo a un modelo de impureza de Anderson efectivo y una posterior representación mediante bosones esclavos. Para ello, seguimos un esquema similar al del capítulo anterior: se diagonaliza el hamiltoniano H_r en los subespacios con número de electrones n definido, y se busca una representación del hamiltoniano de la Ec.(5.23) en términos de los autoestados de H_r . Posteriormente, se procede a truncar aquellos estados de mayor energía. Dado que el hamiltoniano posee simetría electrón-hueco, sólo nos concentraremos en la zona donde las fluctuaciones de

carga más relevantes son aquellas entre los subespacios con $n = 3$ y $n = 4$ partículas. Gracias a esta simetría, los resultados para las fluctuaciones entre $n = 4$ y $n = 5$ son idénticos.

Del subespacio de $n = 3$ electrones, se retienen sólo los estados de menor energía, que corresponden al subespacio de $S = 1/2$, para cada proyección de spin, y sólo el estado fundamental de $S = 0$ del subespacio de $n = 4$. Este truncamiento permite mapear el problema a un modelo de impureza efectiva de Anderson ya que se conserva la simetría $SU(2)$ de los estados mapeados, y nos permite escribir el modelo

$$H = H_c + H_r + H_{mix}, \quad (5.25)$$

$$H_c = \sum_{i=0,\sigma}^{-\infty} t_c c_{i-1,\sigma}^\dagger c_{i,\sigma} + \sum_{i=1,\sigma}^{\infty} t_c c_{i+1,\sigma}^\dagger c_{i,\sigma} + \text{H.c.}, \quad (5.26)$$

$$H_r = \sum_{j,\sigma} E_{j,\sigma}^{(3)} |\psi_{j,\sigma}^{(3)}\rangle \langle \psi_{j,\sigma}^{(3)}| + E_0^{(4)} |\psi_0^{(4)}\rangle \langle \psi_0^{(4)}|,$$

$$H_{mix} = V \sum_{j,\sigma,\eta=0,1} \alpha_{j,\sigma}^\eta |\psi_0^{(4)}\rangle \langle \psi_{j,\bar{\sigma}}^{(3)}| c_{\eta,\sigma} + \text{H.c.}, \quad (5.27)$$

donde

$$\begin{aligned} \alpha_{j,\sigma}^1 &\equiv \langle \psi_0^{(4)} | d_{0,\sigma}^\dagger | \psi_{j,\bar{\sigma}}^{(3)} \rangle, \\ \alpha_{j,\sigma}^0 &\equiv \langle \psi_{j,p}^{(4)} | d_{N/2,\sigma}^\dagger | \psi_{j,\bar{\sigma}}^{(3)} \rangle. \end{aligned} \quad (5.28)$$

Utilizando una representación de bosones esclavos de Coleman (ver Sec. 3.2)

$$\begin{aligned} |\psi_{j,\uparrow}^{(3)}\rangle &\rightarrow f_{j,\downarrow} |\tilde{0}\rangle, \\ |\psi_{j,\downarrow}^{(3)}\rangle &\rightarrow -f_{j,\uparrow} |\tilde{0}\rangle, \\ |\psi_0^{(4)}\rangle &\rightarrow e^\dagger |\tilde{0}\rangle, \end{aligned} \quad (5.29)$$

donde el signo $-$ se introduce para que la descripción respete la simetría $SU(2)$ al trabajar con los operadores de destrucción de partículas $f_{j,\sigma}$ sobre un estado completamente lleno de fermiones $|\tilde{0}\rangle$, el que hemos definido como el nuevo “vacío”. De esta manera se obtiene un hamiltoniano que conserva el número de fermiones. Las pseudo-partículas están sujetas al vínculo generalizado

$$\sum_{j,\sigma} f_{j,\sigma}^\dagger f_{j,\sigma} + e^\dagger e = 1, \quad (5.30)$$

que, como es habitual, se incorpora mediante el multiplicador de Lagrange λ . Finalmente, realizando la aproximación de punto de ensilladura, el hamiltoniano efectivo que se obtiene

es

$$H'_{eff}(\lambda) = H_c + H_r + H_{mix} + H_{constr}, \quad (5.31)$$

$$H_c = \sum_{i=0,\sigma}^{-\infty} t_c c_{i-1,\sigma}^\dagger c_{i,\sigma} + \sum_{i=1,\sigma}^{\infty} t_c c_{i+1,\sigma}^\dagger c_{i,\sigma} + \text{H.c.}, \quad (5.32)$$

$$H_r = \sum_{j,\sigma} E_{j,\sigma}^{(3)} f_{j,\sigma}^\dagger f_{j,\sigma} + E_0^{(4)} e_0^2,$$

$$H_{mix} = \sum_{j,\sigma,\eta=0,1} V_{j,\sigma}^\eta f_{j,\sigma}^\dagger c_{\eta,\sigma} + \text{H.c.},$$

$$H_{constr} = \lambda \left(\sum_{j,\sigma} f_{j,\sigma}^\dagger f_{j,\sigma} + e_0^2 - 1 \right), \quad (5.33)$$

donde $V_{j,\sigma}^\eta = V e_0 \alpha_{j,\sigma}^\eta$ y donde todos los efectos de la interacción spin-órbita, el campo magnético, el cambio de base, etc, están contenidos en los parámetros efectivos $\alpha_{j,\sigma}^\eta$, $E_{j,\sigma}^{(3)}$ y $E_0^{(4)}$.

Si insistimos en utilizar la tradicional base de S_z para analizar, por ejemplo, la transmitancia, vemos que un electrón que viaja de izquierda a derecha con una cierta proyección de spin σ en la cadena de la izquierda sufre una dispersión dependiente del spin al llegar al sitio efectivo. Este resultado de nuestro modelo está corroborado por resultados similares para el caso no interactuante, donde la conductancia a través del anillo se expresa mediante la formulación de Landauer con una matriz de transmitancia dependiente del spin $T_{\sigma,\sigma'}$ [131, 132].

El próximo paso es resolver las ecuaciones del punto de ensilladura. Para tal fin, utilizando el teorema de Hellman-Feynman [91, 92] obtenemos las ecuaciones

$$0 = \sum_{j,\sigma} \langle f_{j,\sigma}^\dagger f_{j,\sigma} \rangle + e_0^2 - 1, \quad (5.34)$$

$$0 = 2e_0 \left(E_0^{(4)} + \lambda \right) + \sum_{j,\sigma,\eta=0,1} V_j^\eta \langle c_{\eta,2,\sigma}^\dagger f_{j,\sigma} \rangle + \text{H.c.} \quad (5.35)$$

Los valores medios pueden evaluarse mediante el método de funciones de Green y ecuaciones de movimiento. En el Apéndice B.1.2 puede verse detalladamente este cálculo.

5.4 Cálculo de la conductancia

Al igual que en el capítulo anterior, la conductancia puede hallarse mediante la fórmula de Landauer [115] que para este caso es

$$G = \sum_{\sigma} G_{\sigma}, \quad (5.36)$$

$$\frac{G_{\sigma}}{G_0} = 2 (\pi \rho_0 V^2 e_0^2)^2 \left| \sum_{i,j} \bar{\alpha}_{i\sigma}^0 \alpha_{j\sigma}^1 g_{i,j}^{\sigma}(\epsilon_F) \right|^2, \quad (5.37)$$

donde G_0 es $2e^2/h$ y la matriz de la función de Green del sitio efectivo acoplado a los contactos es (ver Apéndice B.1.2)

$$g_{i,j}^\sigma = g_{i,j}^{0\sigma} + \frac{e_0^2 V^2 g_{ii}^{0\sigma} g_{jj}^{0\sigma}}{A_{11}^\sigma A_{00}^\sigma - A_{10}^\sigma A_{01}^\sigma} \sum_{\eta, \eta'} \alpha_{i\sigma}^\eta \bar{\alpha}_{j\sigma}^{\eta'} A_{\eta\eta'}^\sigma, \quad (5.38)$$

donde

$$g_{i,j}^{0\sigma}(\omega) = \delta_{i,j} \frac{1}{\omega - E_{j,\sigma}^{(3)} - \lambda},$$

es el propagador del fermión $f_{j,\sigma}$ del sitio efectivo aislado. Las funciones $A_{\eta,\eta'}^\sigma(\omega)$ son

$$\begin{aligned} A_{\eta,\eta}^\sigma(\omega) &= 1 - e_0^2 V^2 g_\eta^{(0)}(\omega) \sum_m \frac{|\alpha_{m,\sigma}^\eta|^2}{\omega - E_{m,\sigma}^{(3)} - \lambda} \quad \text{para } \eta = \eta' \\ A_{\eta,\eta'}^\sigma(\omega) &= e_0^2 V^2 g_\eta^{(0)}(\omega) \sum_m \frac{\alpha_{m,\sigma}^\eta \bar{\alpha}_{m,\sigma}^{\eta'}}{\omega - E_{m,\sigma}^{(3)} - \lambda} \quad \text{para } \eta \neq \eta', \end{aligned} \quad (5.39)$$

donde $g_\eta^{(0)}(\omega)$ es la función de Green en el sitio 0 ó 1 de la cadena semi-infinita con $V = 0$. En el Apéndice B.1.2 se muestran detalladamente estas derivaciones.

5.5 Resultados

Debido a la gran cantidad de parámetros presentes en el hamiltoniano de la Ec.(5.23), es conveniente buscar una manera de distinguir los diversos regímenes que pueden existir en el sistema estudiado. En la Fig. 5.2 se muestra un diagrama en el espacio de parámetros del hamiltoniano y los distintos regímenes que se inducen en el sistema esquematizado en la Fig. 5.1 a $T = 0$. Utilizando como unidad de energías el elemento de matrix de hopping t , exploramos el espacio de parámetros variando V_g , U y V . Nos concentramos en una zona de este diagrama en la cual los parámetros son tales que favorecen una carga $n = 3$ o $n = 4$ en el anillo aislado ($V = 0$).

Partiendo del caso $V = 0$ (anillo desacoplado) y para U grande, el estado fundamental del sistema corresponde a un estado con $n = 3$ ($E_0^{(3)} < E_0^{(4)}$). A medida que $-V_g$ crece (favoreciendo una carga mayor en cada punto cuántico), el estado fundamental de $n = 4$ comienza a acercarse al de $n = 3$, hasta que eventualmente estos niveles se cruzan y el nuevo estado fundamental corresponderá a un estado con $n = 4$, es decir $E_0^{(4)} < E_0^{(3)}$. Esto define la curva $U^*(V_g)$ (en el plano basal de la Fig. 5.2) y corresponde a todos los puntos U y V_g para los cuales $E_0^{(3)} = E_0^{(4)}$.

Podemos pensar que esta situación corresponde al límite atómico del modelo de Anderson. Cuando se “enciende” el parámetro V , el nuevo estado fundamental es un estado de muchos cuerpos no trivial, y en general, es alguna mezcla que contiene estados con $n = 3$ y $n = 4$. Para $V \rightarrow 0$, una pequeña variación en los parámetros V_g ó U produce una gran variación en el peso de las componentes de $n = 3$ y $n = 4$. A medida que V crece, aparece una zona en las que las fluctuaciones de la carga son cada vez más importantes, una zona de

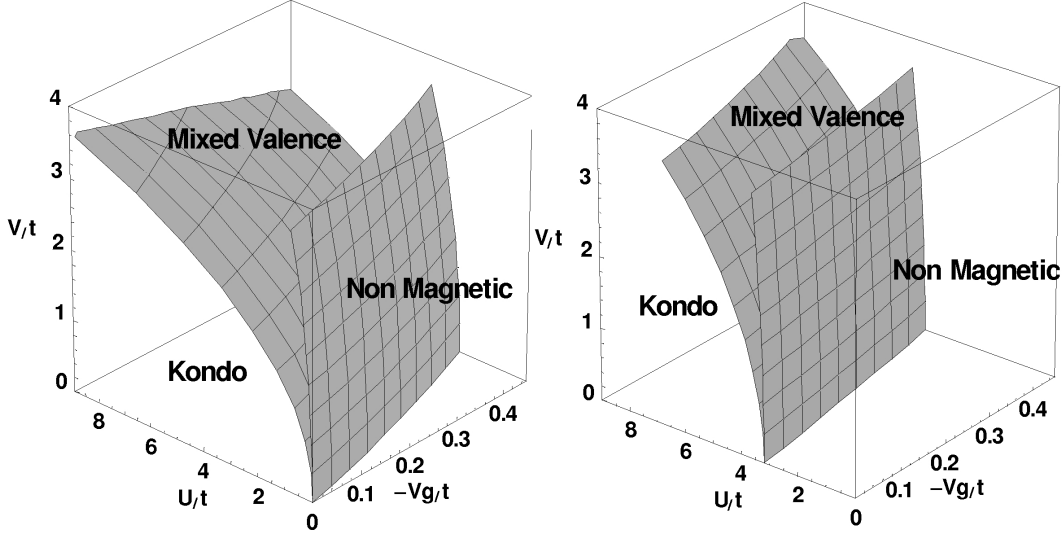


Figura 5.2: Regímenes de parámetros del anillo con $N_d = 4$ para $\phi = 0$ y $\phi = \pi$.

“valencia intermedia”. Para definir estas zonas, utilizamos criterios análogos a los usados en el artículo de Wilson sobre el Grupo de Renormalización Numérico [23]: un régimen de momento localizado o de Kondo, en el que $\Gamma \ll E_0^{(4)} - E_0^{(3)}$, donde $\Gamma = \pi\rho_0 V^2 (|\alpha_0^1|^2 + |\alpha_0^0|^2)$ es la hibridación efectiva; una zona de valencia mixta $\Gamma \simeq |E_0^{(3)} - E_0^{(4)}|$, una zona “no magnética” $\Gamma > |E_0^{(3)} - E_0^{(4)}|$ y finalmente, una zona de “orbital vacío”, en general cuando $E_0^{(3)} > E_0^{(4)}$. La superficie que separa la zona de régimen de momento localizado de la zona de valencia mixta se define como aquella en la que $E_0^{(3)} = E_0^{(4)} - 8\Gamma$, mientras que la superficie que separa la zona de valencia mixta de la zona no magnética verifica $E_0^{(3)} = E_0^{(4)} + \Gamma$. Cuando $V \rightarrow 0$, ambas superficies tienden suavemente a la misma curva $U^*(V_g)$.

Vemos que la posición de las superficies cambia cuando se modifica el flujo magnético ϕ , en virtud de la dependencia de los parámetros del modelo de Anderson efectivo $E_j^{(n)}$ y $\alpha_{j,\sigma}^\eta$ con el campo magnético. Esto tiene consecuencias importantes en la conductancia, ya que desde este punto de vista, el flujo magnético es una variable más que permite “sintonizar” el sistema en un régimen u otro.

Mencionamos anteriormente que el truncamiento de estados restringe la validez del método a valores de V pequeños. Esto se traduce en que la zona válida para explorar la conductancia será aquella cercana a la base de la Fig.5.2.

Con esta clasificación de regímenes, se espera que, más allá de los detalles particulares, producto del particular punto elegido en el espacio de parámetros, todas las curvas de conductancia de una misma región tengan las mismas características generales.

5.5.1 Conductancia en el régimen no magnético. Comparación con otros métodos

En primer lugar, mostramos resultados para la conductancia en el régimen no magnético, es decir, cuando $E_0^{(4)} < E_0^{(3)}$. En particular, se eligió una zona del espacio de parámetros dada por los puntos $-V_g/t = 0.8$, $U/t = 2.0$, y variando el parámetro V/t en el rango $0.25 < V/t < 1$. Como puede verse en la Fig.5.2, esa zona corresponde a la región no magnética.

En diversos trabajos se han calculado las propiedades de un sistema mesoscópico interactuante, débilmente acoplado a contactos metálicos, en forma perturbativa, calculando exactamente las propiedades del sistema interactuante para $V = 0$, cuando su estado fundamental es no degenerado [134, 135, 136].

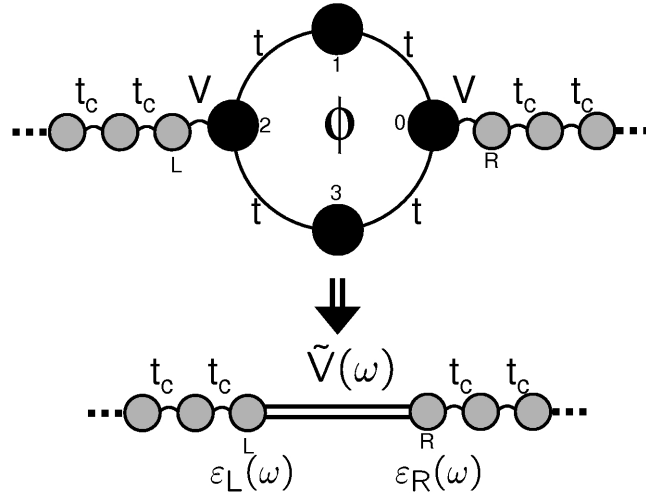


Figura 5.3: Modelo efectivo de dos sitios acoplados débilmente mediante el elemento $\tilde{V}(\omega)$ [135, 136].

La expresión de la conductancia en este caso puede derivarse mediante el formalismo de Landauer a orden V^2 , mapeando el problema a la transmitancia a través de dos sitios *efectivos* L y R (ver Fig. 5.3). La transmitancia $T_{\sigma,\sigma}(\omega)$ es [134, 135, 136]

$$T_{\sigma,\sigma}(\omega) = |t_{\sigma,\sigma}(\omega)|^2 = \frac{4\Gamma^2 |\tilde{V}_\sigma(\omega)|^2}{\left| [\omega - \varepsilon_{L,\sigma}(\omega) + i\Gamma] [\omega - \varepsilon_{R,\sigma}(\omega) + i\Gamma] - |\tilde{V}_\sigma(\omega)|^2 \right|^2}, \quad (5.40)$$

donde $\varepsilon_{L,\sigma}(\omega) = V^2 \mathcal{G}_{N_d/2, N_d/2}^{(0),\sigma}(\omega)$, $\varepsilon_{R,\sigma}(\omega) = V^2 \mathcal{G}_{0,0}^{(0),\sigma}(\omega)$ y $\tilde{V}_\sigma(\omega) = V^2 \mathcal{G}_{N_d/2,0}^{(0),\sigma}(\omega)$, donde las funciones de Green retardadas del cluster desacoplado $\mathcal{G}_{a,b}^{(0),\sigma}(\omega)$ se pueden calcular formalmente a $T = 0$ como [139, 62]

$$\mathcal{G}_{a,b}^{(0),\sigma}(\omega) = \left\langle \Psi_0 \left| d_{a,\sigma} \frac{1}{\omega + E_0 - H + i0^+} d_{b,\sigma}^\dagger \right| \Psi_0 \right\rangle + \left\langle \Psi_0 \left| d_{b,\sigma}^\dagger \frac{1}{\omega - E_0 + H + i0^+} d_{a,\sigma} \right| \Psi_0 \right\rangle. \quad (5.41)$$

donde $|\Psi_0\rangle$ es el estado fundamental del cluster desacoplado ³ y E_0 su energía fundamental. Introduciendo una representación de Lehmann, se obtiene [139]

$$\mathcal{G}_{a,b}^{(0),\sigma}(\omega) = \sum_j \frac{\langle \Psi_0 | d_{a,\sigma} | \psi_j \rangle \langle \psi_j | d_{b,\sigma}^\dagger | \Psi_0 \rangle}{\omega + E_0 - \epsilon_j + i0^+} + \frac{\langle \Psi_0 | d_{b,\sigma}^\dagger | \psi_j \rangle \langle \psi_j | d_{a,\sigma} | \Psi_0 \rangle}{\omega - E_0 + \epsilon_j + i0^+}. \quad (5.42)$$

donde los estados $|\psi_j\rangle$ son autoestados de H con una partícula más (o menos) que $|\Psi_0\rangle$. Al concentrarnos en las fluctuaciones de carga entre las configuraciones $n = 3$ y $n = 4$, cerca la la energía de Fermi ($\omega = 0$), y dado que el estado fundamental del cluster $|\Psi_0\rangle$ pertenece a una de estas dos configuraciones, podemos despreocupar uno de los términos a la derecha de la igualdad en la Ec.(5.42). Por otra parte, en el régimen no magnético tenemos $|\Psi_0\rangle = |\psi_0^{(4)}\rangle$ y $E_0 = E_0^{(4)}$. Los estados excitados corresponden a los autoestados con $n = 3$, $|\psi_j\rangle = |\psi_{j,\sigma}^{(3)}\rangle$, $\epsilon_j = E_{j,\sigma}^{(3)}$, y reemplazando los elementos de matriz por las definiciones de la Ec.(5.28), $\alpha_{j,\sigma}^0 \equiv \langle \psi_0^{(4)} | d_{Nd/2,\sigma}^\dagger | \psi_{j,\sigma}^{(3)} \rangle$ y $\alpha_{j,\sigma}^1 \equiv \langle \psi_0^{(4)} | d_{0,\sigma}^\dagger | \psi_{j,\sigma}^{(3)} \rangle$, podemos escribir la Ec.(5.42) en la forma

$$\begin{aligned} \mathcal{G}_{a,b}^{(0),\sigma}(\omega) &\simeq \sum_j \frac{\alpha_{j,\sigma}^a \bar{\alpha}_{j,\sigma}^b}{\omega - E_0^{(4)} + E_{j,\sigma}^{(3)} + i0^+}, \\ &= \sum_j \alpha_{j,\sigma}^a \bar{g}_{j,j}^{(0)\sigma}(-\omega) \bar{\alpha}_{j,\sigma}^b. \end{aligned} \quad (5.43)$$

El ancho Γ del nivel efectivo $\varepsilon_{L(R),\sigma}(\omega)$ aparece por su acoplamiento con la semicadena infinita (ver Fig. 5.3). Usando ecuaciones de movimiento, y suponiendo una densidad de estados ρ_c constante en las semicadenas, puede verse que $\Gamma = \pi \rho_c t_c^2$. Usando la equivalencia de la Ec. (4.37) para la densidad de estados en E_F en el extremo de una semicadena infinita, se obtiene $\Gamma = t_c$.

Los resultados presentados en la Fig. 5.4 muestran cálculos de la conductancia a través del anillo utilizando el modelo de la impureza efectiva de Anderson con la aproximación de bosones esclavos en campo medio de las secciones anteriores, y el método perturbativo mencionado usado en las Refs. [134, 135, 136]. Puede verse que ambos métodos dan el mismo resultado en el límite $V \rightarrow 0$. Esta equivalencia se entiende fácilmente analizando la Ec.(5.37) en el límite $V \rightarrow 0$. Notamos que en el límite $V \rightarrow 0$, la Ec.(5.40) a orden V^2 en el nivel de Fermi es

$$T_{\sigma,\sigma}(E_F) \simeq \frac{4V^4}{t_c^2} \left| \sum_j \frac{\bar{\alpha}_{j,\sigma}^0 \alpha_{j,\sigma}^1}{-E_0^{(4)} + E_{j,\sigma}^{(3)} + i0^+} \right|^2. \quad (5.44)$$

En el caso del método de bosones esclavos, tomando el límite $V \rightarrow 0$, las ecuaciones del campo medio dan $e_0 \rightarrow 1$ y $\lambda \rightarrow -E_0^{(4)}$. Por otro lado partiendo de la Ec. (5.38), se

³Notar que las funciones de Green exactas del cluster desacoplado $\mathcal{G}_{a,b}^{(0),\sigma}(\omega)$, donde a y b son los *sitios* $i = a, b$ tienen sentido desde el punto de vista físico, mientras que las funciones de Green del problema efectivo que hemos definido como $g_{i,j}^\sigma(\omega)$, donde i y j corresponden a los *estados* $|\psi_{i,\sigma}^{(3)}\rangle$ y $|\psi_{j,\sigma}^{(3)}\rangle$, son solamente herramientas de cálculo.

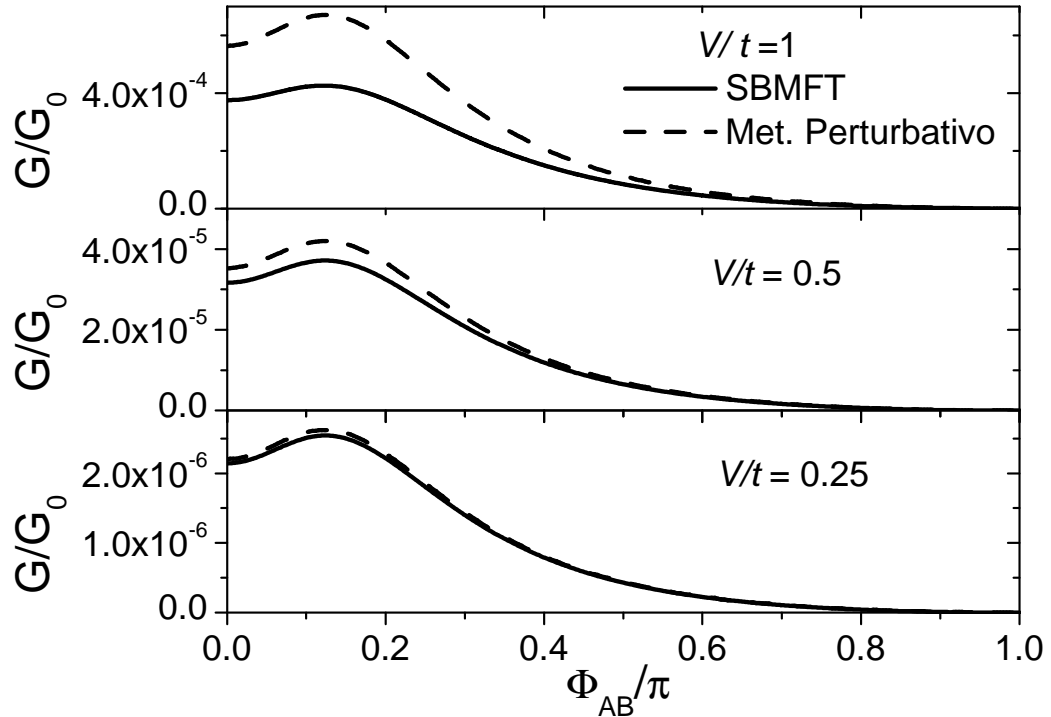


Figura 5.4: Conductancia a través del anillo en la región no magnética, calculada mediante el método perturbativo [134, 135, 136] y el método de la impureza de Anderson efectiva usando bosones esclavos en campo medio.

obtiene $g_{i,j}(\omega) \rightarrow g_{i,j}^{(0)}(\omega)$ en el límite $V \rightarrow 0$, con lo cual, reemplazando estos resultados en la Ec.(5.37), se obtiene la expresión a orden V^2

$$\begin{aligned} \frac{G_\sigma}{G_0} &\simeq (2\pi\rho_c V^2)^2 \left| \sum_j \bar{\alpha}_{j,\sigma}^0 g_{j,j}^{(0)\sigma}(E_F) \alpha_{j,\sigma}^1 \right|^2, \\ &\simeq \frac{4V^4}{t_c^2} \left| \sum_j \frac{\bar{\alpha}_{j,\sigma}^0 \alpha_{j,\sigma}^1}{E_0^{(4)} - E_{j,\sigma}^{(3)} + i0^+} \right|^2, \end{aligned} \quad (5.45)$$

donde se usó que, para el caso de las cadenas semi-infinitas (Ec. (4.37)), la densidad de estados es $\rho_c = 1/\pi t_c$. Vemos que ambas expresiones para la conductancia (método perturbativo y método del modelo de Anderson efectivo con bosones esclavos) en el límite $V \rightarrow 0$ son idénticas, lo que explica la equivalencia en la Fig. 5.4. Los detalles de la conductancia dependen de la particular estructura de niveles en el anillo y su dependencia con el flujo magnético. Sin embargo, en el punto $\Phi_{AB}/\pi = 1$ se obtiene una cancelación de la conductancia por interferencia destructiva entre los diferentes canales del anillo. Este resultado es consistente con anteriores estudios en sistemas análogos en el régimen no magnético [136, 134].

5.5.2 Conductancia en el régimen de Kondo y de valencia intermedia

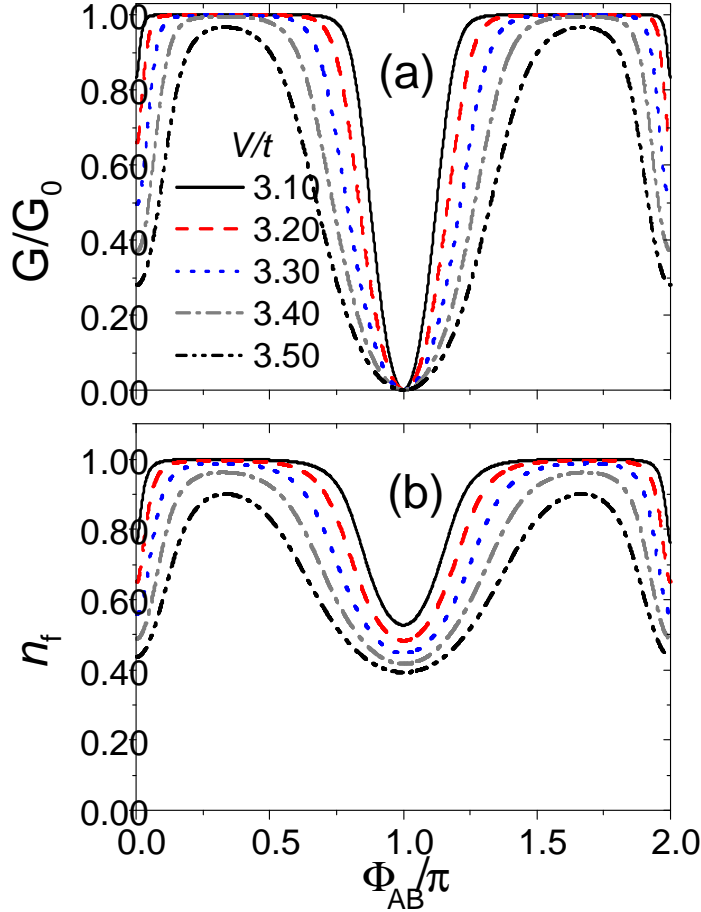


Figura 5.5: Conductancia a través del anillo en el régimen magnético, calculada mediante el método de la impureza de Anderson efectiva usando bosones esclavos en campo medio, para varios valores de V y para $\alpha_{SO} = 0$.

Los resultados más importantes de este capítulo son aquellos obtenidos cuando en el anillo existe un momento local no compensado, es decir, en los regímenes de Kondo y de valencia mixta (ver Fig. 5.2). En la actualidad no existe un método confiable para estudiar la conductancia a través de cluster de varios sitios. El método perturbativo a orden V^2 no es válido en esta región debido a que el estado fundamental del anillo desacoplado está degenerado y corresponde a un doblete $S = 1/2$ ⁴. En la Fig. 5.5 se muestran los resultados en este régimen en función del flujo magnético ϕ , para varios valores de V , de manera de explorar la zona de Kondo y de valencia intermedia. En particular, se eligió una zona del

⁴Recordar que estamos despreciando el efecto Zeeman.

espacio de parámetros dada por los puntos $-V_g/t = 0.0$, $U/t = 6.0$, y se varió el parámetro V/t en el rango $3.1 < V/t < 3.5$. Como puede verse en la Fig.5.2, esa zona corresponde a la región magnética y de valencia intermedia. En estos cálculos, se fijó $\alpha_{SO} = 0$.

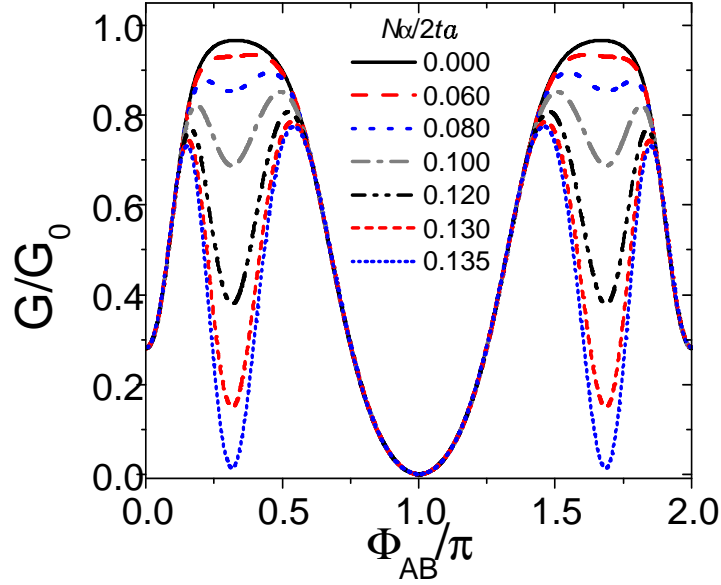


Figura 5.6: Conductancia en función de Φ_{AB} , para varios valores del acoplamiento spin-órbita de Rashba α_{SO} .

Al igual que el caso de la conductancia a través del trímero (Cap. 4), cuando las fluctuaciones de la carga están congeladas, la presencia del efecto Kondo se traduce en una saturación de la conductancia en G_0 , gracias a la formación de un estado ligado virtual a través del cual pueden pasar los electrones de un contacto al otro (singlete de Kondo).

La característica más llamativa de este resultado es la completa anulación de la conductancia cuando $\Phi_{AB}/\pi = 1$. En el caso no interactuante, esto se explica fácilmente en términos de una interferencia destructiva completa por el efecto Aharonov-Bohm. En el caso del anillo interactuante con flujo $\Phi_{AB}/\pi = 1$, puede verse que el hamiltoniano de la Ec.(5.23) es invariante ante una reflexión $d_{j,\sigma} \rightarrow d_{N_d-j,\sigma}$ y el cambio de signo en el sitio $i = 0$, $d_{0,\sigma} \rightarrow -d_{0,\sigma}$ simultáneos, mientras que la función de Green del cluster $\mathcal{G}_{N_d/2,0}$ cambia de signo, con lo cual también debe anularse la conductancia [136]. Desde el punto de vista técnico del presente modelo, la conductancia se anula por la degeneración de estados con distinta paridad, lo que produce elementos de matriz $\alpha_{j,\sigma}^\eta$ de igual módulo y diferente signo, cancelándose idénticamente la suma dentro del valor absoluto de la Ec.(5.37). Para verificar que se trata efectivamente de una interferencia destructiva, en la Fig. 5.5 (b) se muestra el valor de la ocupación total de los niveles f , $n_f = \sum_{j,\sigma} \langle f_\sigma^\dagger f_\sigma \rangle$. Lejos del punto $\Phi_{AB}/\pi = 1$, la conductancia se comporta de manera muy similar a la ocupación n_f , un resultado esperado para los líquidos de Fermi, en virtud de la Ec. (4.48). Sin embargo, la cancelación en $\Phi_{AB}/\pi = 1$ se produce para una ocupación finita n_f , lo que sugiere una interferencia destructiva completa

entre los diversos canales del anillo. El método de bosones esclavos en campo medio sugiere una interpretación en términos de cuasipartículas no interactuantes. Esto indica que son las cuasipartículas en el nivel de Fermi las que acumulan una fase de Aharonov-Bohm e interfieren destructivamente al salir del anillo. Cuando se incrementa el valor del acoplamiento

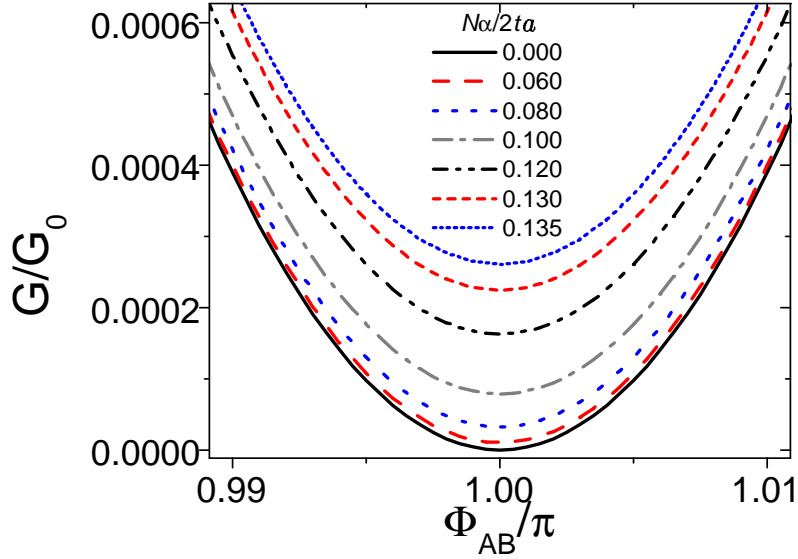


Figura 5.7: Detalle de la conductancia cerca de $\Phi_{AB} = \pi$, para varios valores del acoplamiento spin-órbita de Rashba α_{SO} .

V , la carga en el anillo comienza a fluctuar y entramos en el régimen de valencia intermedia. En este caso, el efecto Kondo se debilita y la conductancia decrece desde el valor ideal G_0 .

Al igual que lo señalado en el capítulo anterior, el método del mapeo y la representación de bosones esclavos en campo medio no permiten estudiar las propiedades del sistema cuando el estado fundamental tiene degeneraciones distintas a la de Kramers [121, 122]. Por esta razón, rigurosamente, el método no permite acceder a los puntos $\Phi_{AB}/\pi = m$, donde m es un entero. Sin embargo, como puede verse en la Fig. 5.5, la interferencia destructiva es robusta, en el sentido que se produce en un entorno de los puntos $\Phi_{AB}/\pi = 2m + 1$, donde el método es válido. Por otra parte, desde el punto de vista experimental, la situación de simetría de paridad perfecta (y la consecuente degeneración orbital del estado fundamental) es muy difícil de lograr.

5.5.3 Efectos de la interacción spin-órbita Rashba

En esta sección nos centraremos en el estudio de los efectos de la interacción Rashba en la conductancia. En la Fig.5.6 se muestra la conductancia en función de Φ_{AB} para diversos valores de la constante α_{SO} .

A medida que el valor de α_{SO} aumenta, aparecen “*dips*” cada vez más notorios donde la conductancia con $\alpha_{SO} = 0$ era máxima. Este efecto es debido a la destrucción paulatina

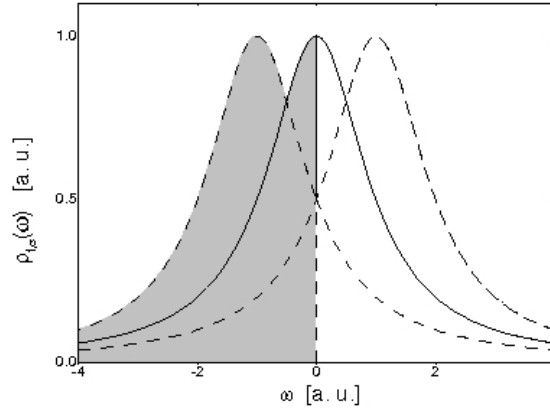


Figura 5.8: Detalle esquemático del desdoblamiento de la resonancia de Kondo por efecto de la interacción spin-órbita de Rashba. Este efecto es análogo al efecto Zeeman.

del efecto Kondo producido por un desbalance en la ocupación f , $n_{f,\uparrow} \neq n_{f,\downarrow}$ cuando la interacción Rashba $\alpha_{SO} \neq 0$. En este sentido, la interacción Rashba produce un efecto similar a un término Zeeman, generando una separación de los dobletes $S = 1/2$ inicialmente degenerados por la degeneración de Kramers.

Otro efecto de la interacción spin-órbita es la pérdida de la cancelación perfecta de la conductancia para $\Phi_{AB} = \pi$ (ver Fig. 5.7). Esto puede entenderse pensando que las cuasi-partículas adquieren una fase relativa ligeramente diferente a π debido a la presencia de una fase Aharonov-Casher adicional.

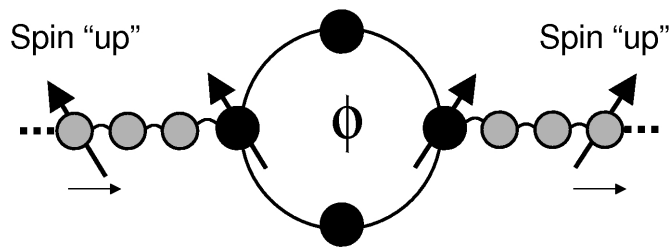


Figura 5.9: Esquema del transporte polarizado en spin.

La ocupación n_f se obtiene integrando la densidad de estados $\rho_f(\omega)$ hasta el nivel de Fermi. Para $\alpha_{SO} = 0$ y $\Gamma \rightarrow 0$ las resonancias de Kondo para cada spin coinciden exactamente y están aproximadamente centradas en el nivel de Fermi (ver Fig. 5.8). En estas condiciones, E_F coincide aproximadamente con el máximo de $\rho_f(\omega)$, lo que maximiza la conductancia en virtud de la Ec. (5.37). Cuando $\alpha_{SO} \neq 0$, se rompe la degeneración de spin y las resonancias para cada spin se corren en energía en direcciones opuestas. Por consiguiente, las ocupaciones $n_{f,\uparrow} \neq n_{f,\downarrow}$ y el nivel de Fermi coincide ya no coincide con ninguno de los máximos de $\rho_{f,\sigma}(\omega)$, lo que explica la disminución de la conductancia en la Fig. 5.6. Este efecto es más notable cuanto más se encuentra el sistema en el régimen de Kondo ($\Gamma \rightarrow 0$ y

$E_0^{(3)} < E_0^{(4)}$). Al aumentar el valor de Γ (aumentando V ó, como en la Fig.5.6, variando el flujo ϕ), se recupera la conductancia al ensancharse los niveles resonantes, lo que equivale a minimizar el efecto de α_{SO} .

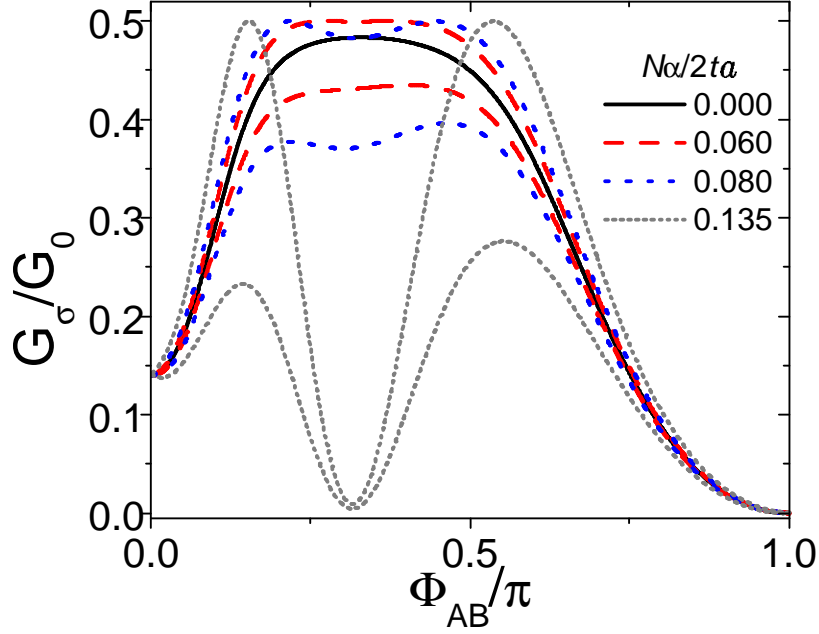


Figura 5.10: Conductancia por spin.

5.5.4 Efectos de las interacciones en el transporte polarizado en spin

Los esfuerzos en el área de la spintrónica están dirigidos a controlar el grado de libertad de spin. Por esta razón estudiamos la conductancia, discriminando las 2 contribuciones de cada spin. Para fijar ideas, supongamos un electrón con su spin polarizado “up” según la dirección \vec{n}_θ (ver Fig. 5.9) en el contacto de la izquierda, donde $\vec{n}_\theta = (-\sin \theta, 0, \cos \theta)$.

Al atravesar el anillo, este electrón es transmitido al contacto de la derecha en una nueva dirección “up”, en virtud de la transformación $\hat{U}(\pi)$. El nuevo eje de cuantización del spin puede hallarse como

$$\hat{U}^\dagger(\pi)\vec{\sigma}\cdot\vec{n}_\theta\hat{U}(\pi) = \vec{\sigma}\cdot\vec{n}'_\theta = (\sin \theta, 0, \cos \theta). \quad (5.46)$$

Es decir, un electrón polarizado con spin σ inyectado en el contacto de la izquierda en la dirección \vec{n}_θ , sale polarizado con spin σ en la nueva dirección \vec{n}'_θ .

En la Fig. 5.10 se muestran los mismos resultados que en la Fig. 5.6 discriminados por spin. En el rango de $0 < \Phi_{AB} < \pi$ mostrado en la Fig. 5.10, siempre la conductancia mayor corresponde a la proyección “up”. La situación es inversa en el rango no mostrado $\pi < \Phi_{AB} < 2\pi$. Diversos trabajos [140, 131] han considerado a este sistema, aunque sin

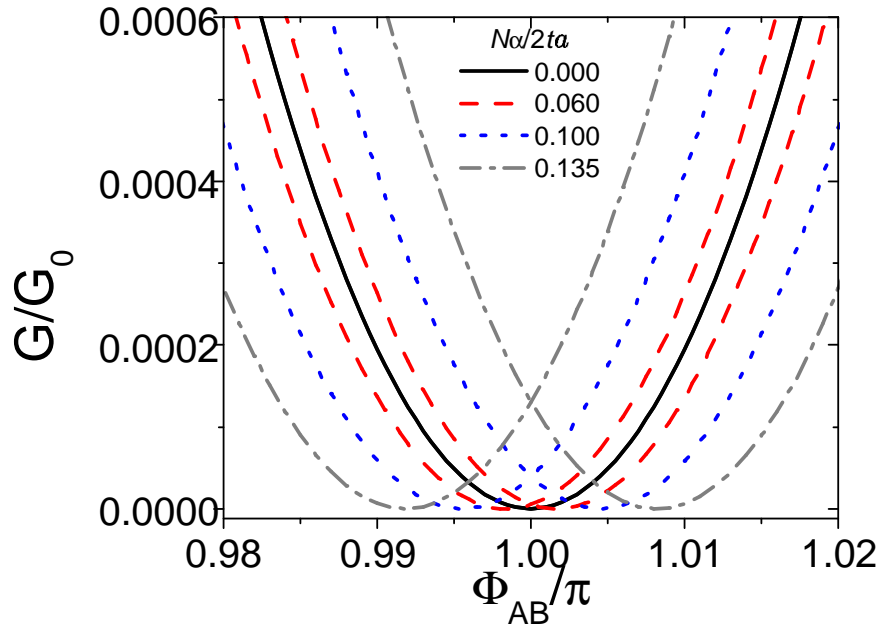


Figura 5.11: Detalle de la conductancia resuelta en spin cerca de $\Phi_{AB} \approx \pi$. Se observa que la cancelación de la conductancia para cada componente G_σ se produce para valores de $\Phi_{AB} \neq \pi$ por el efecto de la interacción spin-órbita.

interacciones, como un filtro de spin, con eficiencias teóricas de 100% (transporte totalmente polarizado) [131].

Lo que demuestra nuestro cálculo incluyendo las correlaciones, es que éstas producen una magnificación en la transmitancia polarizada en spin. Esto puede resultar de interés experimental, ya que para valores bajos de α_{SO} y de flujo magnético Φ_{AB} pueden conseguirse cocientes entre conductancias polarizadas mayores a 2 para $\Phi_{AB} \simeq 0.2\pi$ (ver Fig. 5.10). Incluso se obtienen valores ideales para la conductancia en una de las polarizaciones.

Notamos que para los máximos valores de $N_d\alpha_{SO}/2ta$ utilizados en nuestros cálculos, correspondientes a $N_d\alpha_{SO}/2ta \simeq 0.14$, los ejes de cuantización del spin \vec{n}_θ y \vec{n}'_θ son prácticamente paralelos al eje \hat{z} ($\cos\theta \simeq 0.99$). Es decir que experimentalmente, tales efectos de filtrado de spin deberían serían prácticamente independientes de la orientación.

Resulta interesante también observar la conductancia polarizada cerca del punto $\Phi_{AC} = \pi$. Esta figura es análoga a la Fig. 5.7, y puede observarse el corrimiento sufrido en la cancelación de la conductancia para cada spin.

5.6 Resumen y conclusiones

Hemos presentado un método para calcular la conductancia a través de un anillo formado por puntos cuánticos interactuantes que encierra un flujo magnético ϕ y sometido a una interacción spin-órbita de Rashba, en los regímenes no magnéticos, de valencia intermedia y de Kondo. Los efectos de la interacción spin-órbita se incluyen en una fase Aharonov-Casher a través de una transformación de gauge no abeliana. Con esta transformación fue posible derivar un hamiltoniano de Hubbard con correlaciones locales. Utilizando un mapeo a un modelo de Anderson efectivo, y una representación de bosones esclavos en campo medio, similar a los utilizados en el capítulo anterior, se calculó la conductancia a través del sistema mediante la fórmula de Landauer.

Los resultados muestran que, para valores bajos de V , y cuando el sistema está en el régimen no magnético, el método es equivalente a diversas aproximaciones perturbativas utilizadas previamente [134, 136, 135]. Esta equivalencia puede establecerse analíticamente. Cuando el sistema está en el régimen de Kondo y cuando $\alpha_{SO} = 0$ se obtiene conductancia ideal G_0 para prácticamente todos los valores de Φ_{AB} . Sin embargo, cuando $\Phi_{AB} = \pi(2m + 1)$ con m entero, se obtiene una cancelación perfecta de la conductancia. El método de bosones esclavos en campo medio sugiere una interpretación en términos de cuasipartículas que adquieren una fase relativa π , interfiriendo destructivamente en el anillo. Al aumentar el valor de V , las fluctuaciones de la carga en el anillo son cada vez mayores, lo que debilita el efecto Kondo y la conductancia se aleja de su valor ideal G_0 . Para campos magnéticos bajos, el flujo Φ_{AB} actúa como un parámetro más que permite sintonizar el sistema en un régimen u otro.

La interacción spin-órbita tiene como principal efecto la destrucción del efecto Kondo debido a que actúa como un término de Zeeman, desbalanceando las ocupaciones “up” y “down” en el anillo. Esto a su vez tiene drásticas consecuencias para la conductancia, llegando a anularse debido a la destrucción completa del singlete de Kondo. Este efecto es más notable cuando los parámetros son tales que el sistema está más en el régimen de Kondo.

Finalmente se analizó la posibilidad de considerar el sistema como un polarizador de spin cuando el anillo está en el régimen de Kondo. El efecto de las correlaciones en la polarización del spin consiste en magnificar el efecto de la interacción spin-órbita y del flujo magnético. Para el rango estudiado del parámetro α_{SO} , se obtienen cocientes entre las conductancias polarizadas $\simeq 2$ o más. Esto podría tener interés desde el punto de vista experimental.

Capítulo 6

Resumen y conclusiones generales

En esta tesis estudiamos diversas manifestaciones del efecto Kondo en sistemas de valencia intermedia y en sistemas nanoscópicos, dentro del marco provisto por el modelo de impureza de Anderson. Los avances experimentales y tecnológicos realizados en las últimas décadas han colocado a la física de Kondo bajo condiciones diferentes y novedosas, y cada vez más complejas desde el punto de vista teórico. Es por ello que resulta necesario adaptar las técnicas y métodos conocidos para describir teóricamente estas nuevas situaciones. A lo largo de este trabajo utilizamos extensiones o modificaciones al método de bosones esclavos en campo medio, al método variacional y aproximaciones a la NCA, e implementamos mapeos a modelos efectivos de impureza. Estas técnicas son complementarias y cada una de ellas permite analizar un aspecto del problema y acceder a un cierto tipo de información sobre el sistema.

Propiedades electrónicas de compuestos de Yb

Los compuestos concentrados a base de Yb se consideran los “análogos de huecos” de los compuestos de Ce, ya que en general su valencia fluctúa entre las configuraciones $4f^{13}$ (un hueco f) y $4f^{14}$ (capa f llena). La naturaleza localizada del hueco f da lugar a importantes efectos de correlaciones, que se suman a los efectos del campo cristalino, siempre presentes en alguna medida en estos compuestos.

A pesar de tratarse de sistemas concentrados, muchas de las propiedades termodinámicas de los compuestos de Yb pueden ser interpretadas en términos de los modelos de impureza de Anderson y de Kondo, ya que los efectos de coherencia se ponen de manifiesto en las propiedades termodinámicas y dinámicas a temperaturas menores que T_K . La aproximación a la NCA, propuesta por Zwicknagl, Zevin y Fulde y explicada en el Cap. 2, permite estudiar dichas propiedades en sistemas de impurezas de Anderson diluidas, partiendo de una solución variacional a $T = 0$ que es exacta en el límite $N \rightarrow \infty$, donde N es la degeneración magnética. El modelo original propuesto por los autores mencionados permite introducir los efectos del campo cristalino bajo la forma de niveles de energías de excitación Δ_m ajustables.

Aplicando este método a los compuestos $\text{Yb}_2\text{M}_3\text{Ga}_9$ ($\text{M}=\text{Rh}, \text{Ir}$) y $\text{Yb}_3\text{Ni}_5\text{Al}_{19}$, se obtienen valores para la ocupación de huecos en la capa f a $T = 0$ de $n_f^0 \sim 0.5$, algo que indica fuertes

fluctuaciones de la valencia e itinerancia del hueco f . Una característica de estos compuestos es la similitud entre las escalas de energía del campo cristalino Δ y T_K , algo que resulta inusual en la fenomenología de los sistemas de valencia intermedia.

A pesar de obtenerse ajustes muy razonables para diversos experimentos termodinámicos y dinámicos, existen algunos indicios de efectos de la red periódica. Los resultados teóricos de susceptibilidad mejoran sustancialmente al incluir correlaciones antiferromagnéticas entre momentos magnéticos vecinos, algo que podría considerarse originado, por ejemplo, por la interacción RKKY. Por otra parte la discrepancia entre teoría y experimento en la valencia $n_f(T)$ y la función de scattering $S(\vec{q}, \omega)$ a alta temperatura estarían relacionadas con una liberación macroscópica de carga hacia la banda de conducción, algo ausente en los modelos de impureza.

Eventuales mejoras a los cálculos presentados requieren la introducción de una escala adicional de energía, la temperatura de coherencia T_{coh} , que se relaciona con la formación de un líquido de Fermi coherente a $T = 0$. Métodos autoconsistentes como la *Teoría de Campo Medio Dinámico*, o DMFT (*“Dynamical Mean-Field Theory”*) serían potenciales candidatos para tener en cuenta estos efectos.

Impurezas magnéticas en corrales cuánticos

Los corrales cuánticos son estructuras nanoscópicas que permiten confinar los electrones superficiales de metales como Au(111) o Cu(111). Este confinamiento se traduce en una discretización de los niveles electrónicos dentro del corral. Sin embargo, el confinamiento imperfecto de las paredes provoca que los niveles electrónicos adquieran un ancho relacionado con la vida media finita de un electrón atrapado en el corral.

Los experimentos de STM realizados incorporando una impureza magnética dentro de un corral cuántico permiten combinar la física tradicional de Kondo con los efectos del confinamiento. En estos experimentos, la separación típica de niveles del corral que se acoplan significativamente con la impureza (Δ) es mayor que T_K . Resultados teóricos indican que si $\Delta > T_K$ en sistemas con niveles de conducción discretos y de vida media infinita, no es posible apantallar el momento magnético de la impureza y el efecto Kondo no se produce, contradiciendo lo observado experimentalmente. Por ello, en primer lugar, es esencial un modelo que de cuenta del confinamiento imperfecto en el corral, lo que proporciona un cierto ancho a los niveles electrónico por efectos de vida media. Para lograr esto, modelamos el corral cuántico utilizando un potencial circular deltiforme continuo $W\delta(r - r_0)$, donde r_0 es el radio del corral. El grado de confinamiento puede regularse variando la intensidad del potencial W . Esta aproximación funciona muy bien para posiciones no muy cercanas al borde, donde sería necesario dar cuenta de la discretización atómica de las paredes. Posteriormente usamos un desarrollo en polos discretos del propagador de los electrones superficiales, que tienen una interpretación sencilla en términos de las resonancias discretas del corral cuántico. Esto último mantiene la simplicidad del método, ya que para energías y temperaturas bajas, son suficientes unos pocos términos del desarrollo en resonancias discretas para obtener una descripción razonable de la densidad de estados en el corral.

Usamos una extensión del modelo de impureza de Anderson para tener en cuenta la

hibridización de la impureza con los estados de la superficie, fuertemente modulados espacialmente, y con los estados del bulk. Usando una representación de bosones esclavos en la aproximación de campo medio, en el límite $U \rightarrow \infty$, pudimos obtener resultados teóricos de dI/dV que reproducen las curvas de Fano observadas experimentalmente. Posteriormente calculamos espectros dI/dV en función de la energía para distintas posiciones dentro del corral. La modulación espacial de las funciones de onda confinadas produce una variación de las curvas de Fano de dI/dV al variar la posición de la impureza, lo que podría utilizarse para estimar los pesos relativos de las contribuciones de bulk y de los estados de superficie en el singlete Kondo, un problema que es aún controversial.

Conductancia a través de puntos cuánticos acoplados

Los puntos cuánticos realizados sobre heterojunturas semiconductoras mediante la aplicación de potenciales eléctricos, son sistemas que permiten albergar unos pocos electrones. El confinamiento producido en las 3 direcciones, les confiere propiedades semejantes a los átomos, pero con la ventaja de poder regular la cantidad de electrones, la energía de los niveles, el grado de acoplamiento con el resto del circuito, etc. Estas ventajas los convierten en sistemas con mucha versatilidad para las aplicaciones tecnológicas, aunque también constituyen instrumentos con los cuales se pueden poner a prueba los fundamentos de la teoría cuántica. Por estas razones, el entendimiento de dichos sistemas resulta fundamental.

En esta parte de la tesis nos concentramos en estudiar el efecto Kondo en arreglos de puntos cuánticos, y las consecuencias de ello en el transporte electrónico. Experimentalmente se ha demostrado que un punto cuántico actúa como una impureza magnética cuando el número de electrones que alberga es impar, y a bajas temperaturas. Desde el punto de vista de las aplicaciones, existe mucho interés en el estudio de sistemas de puntos cuánticos acoplados por su eventual uso en spintrónica y en el procesamiento de información cuántica.

Como método general para estudiar el efecto Kondo en sistemas de N_d puntos cuánticos, los modelamos mediante un hamiltoniano de Hubbard con correlaciones en los sitios, acoplando este sistema a contactos metálicos mediante un elemento de matriz V . Primeramente, resolvimos exactamente el problema para $V = 0$ y truncamos el espacio de Hilbert obtenido, reteniendo los niveles de más baja energía en el arreglo de puntos cuánticos acoplados. En general, cuando el número de electrones en el *cluster* es impar, el estado de menor energía es un doblete ($S = 1/2$), y cuando el número es par, el estado fundamental es un singlete ($S = 0$). Cualitativamente, los estados con menor spin total aprovechan mejor la energía cinética que los estados con spin total más alto. Este hecho se aprovecha para mapear los estados retenidos a un modelo efectivo de impureza de Anderson. Usando una representación de bosones esclavos en campo medio de ese hamiltoniano efectivo, calculamos la conductancia a través del sistema de puntos cuánticos con la formulación de Landauer. Esto es posible ya que el sistema efectivo que se obtiene luego de hacer la aproximación de campo medio es un sistema de fermiones no interactuantes.

Por tratarse de una aproximación de baja energía, el método sólo permite describir las propiedades del sistema cerca de la energía de Fermi y a temperaturas bajas, y siempre que el acoplamiento con los contactos (parámetro V) sea pequeño con respecto a la diferencia de

niveles en el arreglo de puntos cuánticos.

Los resultados obtenidos para el caso $N_d = 1$ para la conductancia a $T = 0$ son consistentes con resultados de Grupo de Renormalización Numérico, y en el límite de Kondo la conductancia en función del voltaje de compuerta V_g presenta el típico *plateau* de conductancia ideal $G_0 = 2e^2/h$. Esto también se observa para $N_d = 3$ para diversas geometrías y configuraciones, cuando V_g favorece la ocupación de 1 electrón por sitio.

Con este mismo método, se estudió la conductancia a través de anillos formados por puntos cuánticos, con la idea de estudiar los efectos Aharonov-Bohm y Aharonov-Casher en combinación con la física de Kondo. En primer lugar, se desarrolló un modelo *tight-binding* que incluye los efectos de la interacción spin-órbita de Rashba y los efectos orbitales del campo magnético, a través de una transformación de gauge no abeliana. La ventaja fundamental de esta transformación, es que permite realizar un cambio de base en el sistema para eliminar los términos de *spin-flip* que introduce la interacción spin-órbita, quedando los efectos del campo magnético (exceptuando el efecto Zeeman) y de la interacción spin-órbita, enteramente incluidos a través de una sustitución de Peierls generalizada. A pesar de haber sido propuesta anteriormente, hasta el momento no se había escrito explícitamente la transformación de gauge para el caso de anillos unidimensionales.

Calculamos la conductancia a través del anillo en los regímenes no magnéticos, de valencia intermedia y de Kondo. Cuando el sistema está en el régimen de Kondo y cuando el acoplamiento spin-órbita $\alpha_{SO} = 0$, se obtiene conductancia ideal G_0 para prácticamente todos los valores de la fase de Aharonov-Bohm Φ_{AB} , y anulación perfecta por interferencia destructiva cuando $\Phi_{AB} = \pi$.

La interacción spin-órbita tiene como principal efecto la destrucción del efecto Kondo debido a que actúa como un término de Zeeman, desbalanceando las ocupaciones del spin *up* y *down* en el anillo. Esto a su vez tiene importantes consecuencias para la conductancia, llegando a anularse debido a la destrucción completa del singlete de Kondo. Por otro lado, resulta muy interesante que la interacción spin-órbita permite obtener una polarización en spin de la corriente que circula por el anillo, y que esa polarización se ve magnificada por efecto de las correlaciones.

Las limitaciones del método del mapeo al modelo de impureza efectiva de Anderson están dadas principalmente por el grado de acoplamiento V con los contactos. Este parámetro debe ser pequeño para que puedan eliminarse términos de orden $\mathcal{O}(V)^4$ en el *cluster*, que exploran el subespacio de estados excitados. Otras limitaciones se relacionan con la aproximación de campo medio en la representación de bosones esclavos, que sólo permite estudiar la zona cercana a la energía de Fermi. Por otro lado, esta representación no permite el estudio de sistemas *Non-Fermi liquid*.

Una perspectiva interesante para el método del mapeo sería la incorporación de una representación de bosones esclavos que preserve la simetría de rotación de los estados con spin $S = 1, 3/2, 2, \dots$. En la aproximación de campo medio, esto no es posible porque los bosones condensados no transforman frente a las operaciones del grupo rotaciones. Esta extensión permitiría describir algunos estados excitados del *cluster*. Por otro lado, otros observables del sistema, aparte de la conductancia, se podrían calcular con facilidad con el método del mapeo, como por ejemplo las funciones de correlación de spin en diversos regímenes de parámetros, algo que tendría mucho interés desde el punto de vista tecnológico.

Apéndice A

Desarrollo en $1/N$

A.1 Regla de Suma

Partimos de la fórmula de la Ec. (2.36)

$$\rho_f(\omega) = \frac{(1 + e^{-\beta\omega})}{Z_f} \int_{-\infty}^{\infty} d\epsilon e^{-\beta\epsilon} \rho_0(\epsilon) \rho_m(\omega + \epsilon), \quad (\text{A.1})$$

donde Z_f es, por medio de las Ecs. (2.16) y (2.19)

$$Z_f = \int_{-\infty}^{\infty} d\epsilon e^{-\beta\epsilon} \left(\rho_0(\epsilon) + \sum_m \rho_m(\epsilon) \right). \quad (\text{A.2})$$

De la Ec. (2.36)

$$\rho_f(\omega) \times \frac{1}{1 + e^{-\beta\omega}} = \frac{1}{Z_f} \int_{-\infty}^{\infty} d\epsilon e^{-\beta\epsilon} \rho_0(\epsilon) \rho_m(\omega + \epsilon), \quad (\text{A.3})$$

e integrando ambos miembros con respecto a ω

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \rho_f(\omega) \times \frac{1}{1 + e^{-\beta\omega}} &= \frac{1}{Z_f} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \int_{-\infty}^{\infty} d\epsilon e^{-\beta\epsilon} \rho_0(\epsilon) \rho_m(\omega + \epsilon), \\ \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \rho_f(\omega) \times (1 - f(\omega)) &= \frac{1}{Z_f} \int_{-\infty}^{\infty} d\epsilon e^{-\beta\epsilon} \rho_0(\epsilon) \times \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \rho_m(\omega + \epsilon), \\ 1 - n_f(T) &= \frac{1}{Z_f} \int_{-\infty}^{\infty} d\epsilon e^{-\beta\epsilon} \rho_0(\epsilon) \times 1, \end{aligned} \quad (\text{A.4})$$

donde en la última línea se utilizaron las reglas de suma

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \rho_m(\omega) &= \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \rho_f(\omega) = 1 \\ \int_{-\infty}^{\infty} d\omega f(\omega) \rho_f(\omega) &= n_f(T). \end{aligned} \quad (\text{A.5})$$

Finalmente, despejando de la Ec. (2.22)

$$\begin{aligned} Z_f - \int_{-\infty}^{\infty} d\epsilon e^{-\beta\epsilon} \rho_0(\epsilon) &= \sum_m \int_{-\infty}^{\infty} d\epsilon e^{-\beta\epsilon} \rho_m(\epsilon), \\ 1 - \frac{1}{Z_f} \int_{-\infty}^{\infty} d\epsilon e^{-\beta\epsilon} \rho_0(\epsilon) &= \frac{1}{Z_f} \sum_m \int_{-\infty}^{\infty} d\epsilon e^{-\beta\epsilon} \rho_m(\epsilon), \end{aligned} \quad (\text{A.6})$$

y reemplazando en la Ec. (A.4) se obtiene lo que queríamos demostrar

$$n_f(T) = \frac{1}{Z_f} \sum_m \int_{-\infty}^{\infty} d\epsilon e^{-\beta\epsilon} \rho_m(\epsilon). \quad (\text{A.7})$$

Análogamente, la ocupación parcial del nivel ϵ_{fm} es

$$n_{fm}(T) = \frac{1}{Z_f} \int_{-\infty}^{\infty} d\epsilon e^{-\beta\epsilon} \rho_m(\epsilon). \quad (\text{A.8})$$

A.2 Cálculo de propiedades con la NCA aproximada

Partiendo de la energía libre de Helmholtz

$$F = k_B T \ln Z_f = E_g - k_B T \ln(1 - n_f^0) - k_B T \ln \left(\sum_m \Gamma_m I_m + 1 \right). \quad (\text{A.9})$$

podemos calcular la magnetización y la susceptibilidad

$$\begin{aligned} M &= -\frac{\partial E_g}{\partial B} - k_B T \frac{1}{1 - n_f^0} \frac{\partial n_f^0}{\partial B} + k_B T \frac{1}{\sum_m \Gamma_m I_m + 1} \sum_m \left(\frac{\partial I_m}{\partial B} \Gamma_m + \frac{\partial \Gamma_m}{\partial B} I_m \right), \\ \chi &= \chi_0 - k_B T \left(\frac{1}{1 - n_f^0} \right) \frac{\partial^2 n_f^0}{\partial B^2} + k_B T \left(\frac{1}{\sum_m \Gamma_m I_m + 1} \right) \sum_m \left(\frac{\partial^2 I_m}{\partial B^2} \Gamma_m + \frac{\partial^2 \Gamma_m}{\partial B^2} I_m \right). \end{aligned}$$

Para evaluar las derivadas que aparecen en esta expresión, hacemos uso de la Ec. (2.106) para escribir

$$n_f(T) = \frac{\sum_m \Gamma_m I_m}{1 + \sum_m \Gamma_m I_m}, \quad (\text{A.10})$$

Derivando dos veces esta expresión con respecto a B y evaluando en $B = 0$ obtenemos

$$\frac{\partial^2 n_f(T)}{\partial B^2} = (1 - n_f(T)) \sum_m \frac{\partial^2 \Gamma_m}{\partial B^2} I_m + \Gamma_m \frac{\partial^2 I_m}{\partial B^2}, \quad (\text{A.11})$$

donde se utilizó la simetría de reversión temporal (Ec. (2.112)). Vemos que el resultado queda en función de las derivadas $\partial^2 \Gamma_m / \partial B^2$ y $\partial^2 I_m / \partial B^2$. La primera de ellas será discutida más adelante. Para evaluar la segunda, recordamos la definición de la integral I_m (Ec. (2.107))

$$I_m = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{\pi} \frac{n_F(\epsilon)}{[\omega - T_0 - \Delta_m]^2 + [\Gamma_m(1 - n_f^0)n_F(-\epsilon)]^2} d\epsilon. \quad (\text{A.12})$$

Utilizando la regla de la cadena

$$\frac{\partial I_m}{\partial B} = \frac{\partial I_m}{\partial T_0} \frac{\partial T_0}{\partial B} + \frac{\partial I_m}{\partial \Delta_m} \frac{\partial \Delta_m}{\partial B} + \frac{\partial I_m}{\partial n_f^0} \frac{\partial n_f^0}{\partial B} + \frac{\partial I_m}{\partial \Gamma_m} \frac{\partial \Gamma_m}{\partial B} \quad (\text{A.13})$$

y derivando nuevamente y evaluando para $B = 0$ obtenemos

$$\frac{\partial^2 I_m}{\partial B^2} = \frac{\partial I_m}{\partial T_0} \frac{\partial^2 T_0}{\partial B^2} + \frac{\partial^2 I_m}{\partial \Delta_m^2} \left(\frac{\partial \Delta_m}{\partial B} \right)^2 + \frac{\partial I_m}{\partial \Delta_m} \frac{\partial^2 \Delta_m}{\partial B^2} + \frac{\partial I_m}{\partial n_f^0} \frac{\partial^2 n_f^0}{\partial B^2} + \frac{\partial I_m}{\partial \Gamma_m} \frac{\partial^2 \Gamma_m}{\partial B^2} \quad (\text{A.14})$$

donde nuevamente se utilizó la simetría de reversión temporal (Ec. (2.112)). Utilizando teoría de perturbaciones a segundo orden en B (Ecs. (2.60) y (2.62)) podemos evaluar las derivadas

$$\frac{\partial \Delta_m}{\partial B} = g\mu_B \langle m | J_\alpha | m \rangle, \quad (\text{A.15})$$

$$\frac{\partial^2 \Delta_m}{\partial B^2} = 2(g\mu_B)^2 \sum_{m' \neq m} \frac{|\langle m | J_\alpha | m' \rangle|^2}{\Delta_m - \Delta_{m'}}, \quad (\text{A.16})$$

$$\frac{\partial^2 \Gamma_m}{\partial B^2} = 2(g\mu_B)^2 \sum_{m' \neq m} \frac{(\Gamma_m - \Gamma_{m'}) |\langle m | J_\alpha | m' \rangle|^2}{(\Delta_m - \Delta_{m'})^2}, \quad (\text{A.17})$$

Las derivadas de la integral I_m con respecto a Δ_m , n_f^0 y Γ_m se evalúan numéricamente a partir de la Ec. (2.107). Recordando las definiciones de la Sec. 2.4.1

$$T_0 \equiv \epsilon_{f,1} - E_g, \quad (\text{A.18})$$

$$\Delta_m \equiv \epsilon_{f,m} - \epsilon_{f,1}, \quad (\text{A.19})$$

y teniendo en cuenta que $\partial I_m / \partial T_0 = \partial I_m / \partial \Delta_m$ y que $\partial^2 E_g / \partial B^2 = -\chi_0$, podemos escribir finalmente

$$\chi = \chi_0 - k_B T \left(\frac{1}{1 - n_f^0} \right) \frac{\partial^2 n_f^0}{\partial B^2} + k_B T (1 - n_f(T)) S, \quad (\text{A.20})$$

donde $\partial^2 n_f^0 / \partial B^2$ se obtiene a partir de la Ec. (A.11) a $T = 0$, y donde la función S esta definida como

$$S \equiv \sum_m \left(I_m + \frac{\partial I_m}{\partial \Gamma_m} \right) 2(g\mu_B)^2 \sum_{m' \neq m} \frac{(\Gamma_{m'} - \Gamma_m) |\langle m | J_\alpha | m' \rangle|^2}{(\Delta_m - \Delta_{m'})^2} + \Gamma_m \left(\frac{\partial I_m}{\partial \Delta_m} \chi_0 + \frac{\partial I_m}{\partial n_f^0} \frac{\partial^2 n_f^0}{\partial B^2} + \frac{\partial^2 I_m}{\partial \Delta_m^2} (g\mu_B)^2 |\langle m | J_\alpha | m \rangle|^2 + \frac{\partial I_m}{\partial \Delta_m} 2(g\mu_B)^2 \sum_{m' \neq m} \frac{|\langle m | J_\alpha | m' \rangle|^2}{\Delta_m - \Delta_{m'}} \right). \quad (\text{A.21})$$

A.3 Cálculo Variacional

Partiendo de Ec. (2.47)

$$H_A|\Psi_g\rangle = E_g|\Psi_g\rangle, \quad (\text{A.22})$$

y evaluando miembro a miembro

$$\begin{aligned} H_A|\Psi_g\rangle &= \left[AE_F + \sum_{k,m} \frac{V_{k,m}^*}{\sqrt{N}} b_{k,m} \right] |\tilde{0}\rangle + \left[\sum_{k,m} A \frac{V_{k,m}}{\sqrt{N}} + b_{k,m} (E_F - \epsilon_k + \epsilon_{f,m}) \right] |k, m\rangle \\ E_g|\Psi_g\rangle &= E_g A |\tilde{0}\rangle + E_g \sum_{k,m} b_{k,m} |k, m\rangle, \end{aligned} \quad (\text{A.23})$$

podemos igualar los coeficientes y despejar el valor de $b_{k,m}$

$$b_{k,m} = -\frac{AV_m}{\sqrt{N}} \frac{1}{E_F - \epsilon_k + \epsilon_{f,m} - E_g}. \quad (\text{A.24})$$

Reemplazando en la Ec. (2.48) se obtiene

$$E_g = \sum_{k,m} \frac{V_{k,m}^2}{N} \frac{1}{E_g + \epsilon_k - \epsilon_{f,m}}. \quad (\text{A.25})$$

Pasando al continuo la sumatoria en k y utilizando una densidad de estados constante ρ_c se obtiene la Ec. (2.51)

$$E_g = \sum_m \frac{\Gamma_m}{\pi} \ln \left| \frac{\epsilon_{f,m} - E_g}{D + \epsilon_{f,m} - E_g} \right|, \quad (\text{A.26})$$

donde $\Gamma_m = \pi V_m^2 \rho_c$. Con las definiciones $T_0 \equiv \epsilon_{f,1} - E_g$ y $\Delta_m \equiv \epsilon_{f,m} - \epsilon_{f,1}$, esta ecuación se convierte en la Ec. (2.52)

$$T_0 = \epsilon_{f,1} - \sum_m \frac{\Gamma_m}{\pi} \ln \left| \frac{T_0 + \Delta_m}{D + T_0 + \Delta_m} \right|. \quad (\text{A.27})$$

La constante A se puede hallar imponiendo la normalización de la función de onda igual a 1

$$\begin{aligned} |\langle \Psi_g | \Psi_g \rangle|^2 &= 1 \\ A^2 + \sum_{k,m} |b_{k,m}|^2 &= 1 \end{aligned} \quad (\text{A.28})$$

Utilizando que $n_{f,m}^0 = \langle \Psi_g | (|m\rangle\langle m|) | \Psi_g \rangle = |\langle m | \Psi_g \rangle|^2 = \sum_k |b_{k,m}|^2$ podemos reemplazar en la Ec. (A.28)

$$\begin{aligned} A^2 &= 1 - \sum_m n_{f,m}^0 \\ A^2 &= 1 - n_f^0, \end{aligned} \quad (\text{A.29})$$

donde en la última línea se ha utilizado

$$n_f^0 = \sum_m n_{f,m}^0. \quad (\text{A.30})$$

Una vez que se ha hallado el valor de T_0 que satisface la Ec. (A.27), y por consiguiente, se ha hallado la función de onda $|\Psi_g\rangle$ se pueden calcular todas las propiedades del sistema a $T = 0$. La ocupación del nivel $\epsilon_{f,m}$ es

$$\begin{aligned} n_{f,m}^0 &= \sum_k |b_{k,m}|^2 \\ &= \sum_k \frac{|V_{k,m}|^2}{N} \frac{1 - n_f^0}{(\epsilon_k - T_0 - \Delta_m)^2}, \end{aligned} \quad (\text{A.31})$$

y, como se procedió anteriormente, se pasa la sumatoria en k a una integral en energía usando una densidad de estados constante

$$n_{f,m}^0 = \frac{(1 - n_f^0)\Gamma_m}{\pi} \left(\frac{1}{T_0 + \Delta_m} - \frac{1}{W + T_0 + \Delta_m} \right). \quad (\text{A.32})$$

Esta ecuación junto con la Ec. (A.30), permiten despejar n_f^0

$$\begin{aligned} n_f^0 &= \sum_m n_{f,m}^0 \\ &= \frac{(1 - n_f^0)}{\pi} \sum_m \left(\frac{\Gamma_m}{T_0 + \Delta_m} - \frac{\Gamma_m}{D + T_0 + \Delta_m} \right), \end{aligned} \quad (\text{A.33})$$

y despejando n_f^0 se obtiene la Ec. (2.56).

$$\begin{aligned} n_f^0 &= \sum_m n_{f,m}^0 \\ &= 1 - \frac{1}{1 + \sum_m \frac{\Gamma_m}{\pi} \left(\frac{1}{T_0 + \Delta_m} - \frac{1}{D + T_0 + \Delta_m} \right)}. \end{aligned} \quad (\text{A.34})$$

A.3.1 Densidad de estados $\rho_f(\omega)$

A continuación mostramos cómo se evalúan las funciones $G_{ff,m}^<(\omega)$ y $G_{ff,m}^>(\omega)$ en el límite $N \rightarrow \infty$. Partimos de la Ec. (2.75), en la que es necesario evaluar la matriz del resolvente $R(\omega) = [\omega - E_g + H_A]^{-1}$. Evaluamos dicha matriz entre los elementos de la base $|k\rangle = |0\rangle c_{k,m} |FS\rangle$, $|m', k, k'\rangle = |m'\rangle c_{k',m'} c_{k,m} |FS\rangle$

$$\begin{aligned} 1 &= \langle k | R(\omega) (\omega - E_g + H_A) | k \rangle, \\ 1 &= R_{k,k}(\omega - E_g - \epsilon_k) + \sum_{m' \neq m} \sum_{k'} R_{k,k'km'} \frac{V_{m'}}{\sqrt{N}} + \sum_{k' \neq k} R_{k,k'km} \frac{V_m}{\sqrt{N}}, \end{aligned} \quad (\text{A.35})$$

Evaluando para $R_{k,k'km'}$ con $k', m' \neq k, m$ tenemos

$$0 = R_{k,k'km'}(\omega - E_g + \epsilon_{fm'} - \epsilon_k - \epsilon_{k'}) + R_{k,k} \frac{V_{m'}}{\sqrt{N}}, \quad (\text{A.36})$$

Reemplazando la Ec. (A.36) en la Ec. (A.35) se obtiene

$$1 = R_{k,k}(\omega) \left[\omega - E_g - \epsilon_k - \sum_{k'm' \neq km} \frac{V_{m'}^2}{N} \frac{1}{\omega - E_g + \epsilon_{fm'} - \epsilon_k - \epsilon_{k'}} \right]. \quad (\text{A.37})$$

Definiendo

$$S_{km'}(\omega) = \sum_{k'm' \neq km} \frac{V_{m'}^2}{N} \frac{1}{\omega - E_g + \epsilon_{fm'} - \epsilon_k - \epsilon_{k'}}, \quad (\text{A.38})$$

y pasando al continuo, tenemos

$$\begin{aligned} S_{k,m'}(\omega) &= \frac{\Gamma_{m'}}{\pi} \int_{-D}^0 d\epsilon \frac{1}{\omega + i0^+ - E_g + \epsilon_{fm'} - \epsilon_k - \epsilon}, \\ &= \frac{\Gamma_{m'}}{\pi} \int_0^D dx \frac{1}{\omega + i0^+ \Delta_{m'} + T_0 - \epsilon_k + x}, \\ &= \frac{\Gamma_{m'}}{\pi} \left[\ln \left(\frac{D + \omega + \Delta_{m'} + T_0 - \epsilon_k}{\omega + \Delta_{m'} + T_0 - \epsilon_k} \right) - i\pi\theta(\epsilon_k - \omega - \Delta_{m'} - T_0) \right]. \end{aligned} \quad (\text{A.39})$$

Reemplazando este resultado y el valor de E_g dado por la Ec. (2.51), en la Ec. (A.37) se obtiene la expresión de la Ec. (2.78)

$$\begin{aligned} [R_{k,k}(\omega)]^{-1} &= \omega - \epsilon_k + \sum_m \frac{\Gamma_m}{\pi} \left[\ln \left(\frac{D + T_0 + \Delta_m}{T_0 + \Delta_m} \right) + \ln \left(\frac{\omega + \Delta_m + T_0 - \epsilon_k}{D + \omega + \Delta_m + T_0 - \epsilon_k} \right) \right] - \\ &\quad - i \sum_m \Gamma_m \theta(\epsilon_k - \omega - \Delta_m - T_0), \\ &\simeq \omega - \epsilon_k + \sum_m \frac{\Gamma_m}{\pi} \ln \left(\frac{T_0 + \Delta_m}{\omega + \Delta_m + T_0 - \epsilon_k} \right) - i \sum_m \Gamma_m \theta(\epsilon_k - \omega - \Delta_m - T_0), \end{aligned} \quad (\text{A.40})$$

donde en la última línea se despreciaron los efectos del borde de la banda de conducción. Reemplazando en la Ec. (2.75) y utilizando las Ecs.(A.24) y (A.29), obtenemos

$$\begin{aligned} G_{ff,m}^<(\omega) &= \sum_k |b_{k,m}|^2 R_{kk}(z), \\ &= (1 - n_f^0) \sum_k \frac{V_m^2}{N} \frac{1}{(\Delta_m + T_0 - \epsilon_k)^2} R_{kk}(\omega), \\ &= \frac{(1 - n_f^0) \Gamma_m}{\pi} \int_{-D}^0 d\epsilon \frac{1}{(\Delta_m + T_0 - \epsilon)^2} \times \\ &\quad \times \frac{1}{\omega - \epsilon + \sum_{m'} \left[\frac{\Gamma_{m'}}{\pi} \ln \left| \frac{\omega - \epsilon + \Delta_{m'} + T_0}{\Delta_{m'} + T_0} \right| + i\Gamma_{m'} \theta(\epsilon - \omega - \Delta_{m'} - T_0) \right]} \end{aligned} \quad (\text{A.41})$$

que es el resultado de la Ec. (2.79). En el caso del propagador $G_{ff,m}^>(\omega)$ tenemos (ver Ec.(2.87))

$$G_{ff,m}^>(\omega) = (1 - n_f^0)R_{00}(\omega), \quad (\text{A.42})$$

donde en este caso $R_{00}(\omega) = \langle \tilde{0} | [\omega + E_g - H_A]^{-1} | \tilde{0} \rangle$. Procediendo análogamente al caso anterior, calculamos

$$1 = R_{00}(\omega + E_g - \epsilon_{fm}) + \sum_{k>k_F} R_{0,k} \frac{V_m}{\sqrt{N}}, \quad (\text{A.43})$$

$$0 = R_{0k}(\omega + E_g - \epsilon_k) + R_{00} \frac{V_m}{\sqrt{N}} - \sum_{m',k'<k_F} R_{0,kk'm'} \frac{V_{m'}}{\sqrt{N}}, \quad (\text{A.44})$$

$$0 = R_{0,kk'm'}(\omega + E_g - \epsilon_k - \epsilon_{fm'} + \epsilon_{k'}) - R_{0,k} \frac{V_{m'}}{\sqrt{N}}. \quad (\text{A.45})$$

Reemplazando la Ec. (A.45) en la Ec. (A.44) obtenemos

$$\begin{aligned} 0 &= R_{0k}(\omega - \epsilon_k - \zeta(\epsilon_k, \omega)) + R_{00} \frac{V_m}{\sqrt{N}}, \\ R_{0k} &= -R_{00} \frac{V_m}{\sqrt{N}} \frac{1}{\omega - \epsilon_k - \zeta(\epsilon_k, \omega)}, \end{aligned} \quad (\text{A.46})$$

donde

$$\begin{aligned} \zeta(\epsilon_k, \omega) &= -E_g + \sum_{m',k'<k_F} \frac{V_{m'}^2}{N} \frac{1}{\omega + E_g - \epsilon_k - \epsilon_{fm'} + \epsilon_{k'}}, \\ &= -E_g + \sum_{m'} \frac{\Gamma_{m'}}{\pi} \int_{-D}^0 d\epsilon \frac{1}{\omega + i0^+ + E_g - \epsilon_{fm'} - \epsilon_k + \epsilon}, \\ &= -E_g + \sum_{m'} \frac{\Gamma_{m'}}{\pi} \left[\ln \left(\frac{\omega - \Delta_{m'} - T_0 - \epsilon_k}{\omega - \Delta_{m'} - T_0 - \epsilon_k - D} \right) - i\pi\theta(\omega - \epsilon_k - \Delta_{m'} - T_0) \right]. \end{aligned} \quad (\text{A.47})$$

Reemplazando por el valor de E_g dado por la Ec. (2.51) y despreciando efectos del borde de la banda tenemos

$$\zeta(\epsilon_k, \omega) = \sum_{m'} \frac{\Gamma_{m'}}{\pi} \ln \left(\frac{\epsilon_k - \omega + T_0 + \Delta_{m'}}{T_0 + \Delta_{m'}} \right) - i\pi\theta(\omega - \epsilon_k - \Delta_{m'} - T_0). \quad (\text{A.48})$$

Reemplazando el resultado de la Ec. (A.46) en la Ec. (A.43), la expresión de R_{00} queda entonces

$$\begin{aligned} 1 &= R_{00} \left[\omega + E_g - \epsilon_{fm} - \sum_{k>k_F} \frac{V_m^2}{N} \frac{1}{\omega + E_g - \epsilon_k - \zeta(\epsilon_k, \omega)} \right], \\ [R_{00}]^{-1} &= \omega + E_g - \epsilon_{fm} - \sum_{k>k_F} \frac{V_m^2}{N} \frac{1}{\omega + E_g - \epsilon_k - \zeta(\epsilon_k, \omega)}. \end{aligned} \quad (\text{A.49})$$

Pasando al continuo tenemos la expresión

$$\begin{aligned} [R_{00}]^{-1} &= \omega + i0^+ + E_g - \epsilon_{fm} - \frac{\Gamma_m}{\pi} \int_0^D d\epsilon \frac{1}{\omega + i0^+ + E_g - \epsilon - \zeta(\epsilon, \omega)}, \\ [R_{00}]^{-1} &= \omega + i0^+ - T_0 - \Delta_m - \frac{\Gamma_m}{\pi} \int_0^D d\epsilon \frac{1}{\omega + i0^+ + E_g - \epsilon - \zeta(\epsilon, \omega)}, \end{aligned} \quad (\text{A.50})$$

y reemplazando en la Ec. (A.42) obtenemos finalmente

$$\begin{aligned} G_{ff,m}^>(\omega) &= (1 - n_f^0) R_{00}(\omega), \\ &= \frac{1 - n_f^0}{\omega + i0^+ - T_0 - \Delta_m - \frac{\Gamma_m}{\pi} \int_0^D d\epsilon \frac{1}{\omega + i0^+ + E_g - \epsilon - \zeta(\epsilon, \omega)}}, \end{aligned} \quad (\text{A.51})$$

que es la expresión de la Ec. (2.88).

A.4 Ecuaciones NCA aproximadas

Vamos a demostrar que las Ecs. (2.51) y (2.100) son equivalentes. Partiendo de las ecuaciones que definen la aproximación NCA, Ecs. (2.26) y (2.27), tenemos a orden V^2

$$\Sigma_0^{(1)}(z) = \sum_{k,m} V_m^2 n_F(\epsilon_k) G_m^{(0)}(z + \epsilon_k), \quad (\text{A.52})$$

donde $G_m^{(0)}(z)$ puede encontrarse conociendo las densidades $\rho_m^{(0)}$ a partir de la conocida relación [64]

$$G_m^{(0)}(\omega + i0^+) = -\mathcal{P} \left[\int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{\rho_m^{(0)}(x)}{x - \omega} \right] - i\pi \rho_m^{(0)}(\omega). \quad (\text{A.53})$$

Reemplazando en esta ecuación las expresiones $\rho_m^{(0)}(\omega) = \delta(\omega - \epsilon_{f,m})$ válidas para $V = 0$, obtenemos la sencilla expresión

$$G_m^{(0)}(\omega + i0^+) = \frac{1}{\omega - \epsilon_{f,m}} - i\pi \delta(\omega - \epsilon_{f,m}). \quad (\text{A.54})$$

Reemplazando este resultado en la Ec. (A.52)

$$\begin{aligned} \Sigma_0^{(1)}(\omega + i0^+) &= V_m^2 \sum_{k,m} V_m^2 n_F(\epsilon_k) \left[\frac{1}{\omega + \epsilon_k - \epsilon_{f,m}} - i\pi \delta(\omega + \epsilon_k - \epsilon_{f,m}) \right], \\ &= \sum_m V^2 \int d\epsilon n_F(\epsilon) \rho_c(\epsilon) \left[\frac{1}{\omega + \epsilon - \epsilon_{f,m}} - i\pi \delta(\omega + \epsilon - \epsilon_{f,m}) \right]. \end{aligned} \quad (\text{A.55})$$

Para el caso $T = 0$ y aproximando, como hemos hecho hasta ahora, la banda de conducción por una banda “chata” $\rho_c(\omega) = \rho_c$, se obtiene

$$\begin{aligned} \Sigma_0^{(1)}(\omega + i0^+) &= \sum_m \frac{\Gamma_m}{\pi} \ln \left| \frac{\epsilon_{f,m} - \omega}{\epsilon_{f,m} + D - \omega} \right| - \\ &\quad - i \sum_m \Gamma_m \theta(\omega + \epsilon_{f,m} - D) \theta(\epsilon_{f,m} - \omega). \end{aligned} \quad (\text{A.56})$$

Recordando la Ec. (2.100)

$$\begin{aligned} \omega - \text{Re}\Sigma_0^{(1)}(\omega, T) &= 0, \\ \omega - \sum_m \frac{\Gamma_m}{\pi} \ln \left| \frac{\epsilon_{f,m} - \omega}{\epsilon_{f,m} + D - \omega} \right| &= 0, \end{aligned} \quad (\text{A.57})$$

vemos que coincide exactamente con la Ec. (2.51), cambiando ω por E_g .

Apéndice B

Método de bosones esclavos

B.1 Formulación de Coleman

B.1.1 Modelo de Anderson

Partimos de la expresión de la Ec. (3.23)

$$Z = \int \mathcal{D}[\bar{\psi}, \psi] \mathcal{D}[\bar{e}, e] d\lambda e^{-\beta F[\bar{\psi}, \psi; \bar{e}, e; \lambda]}, \quad (\text{B.1})$$

donde

$$\beta F[\bar{\psi}, \psi; \bar{e}, e; \lambda] = \int_0^\beta d\tau \left[\sum_i \bar{\psi}_i \frac{\partial}{\partial \tau} \psi + \bar{e} \frac{\partial}{\partial \tau} e + H'(\lambda) \right], \quad (\text{B.2})$$

es la funcional de la energía libre total del sistema a una temperatura $T = 1/k_B\beta$ y donde $H'(\lambda) = H + \lambda(Q - 1)$ está dado por la Ec. (3.6). Las variables de Grassman $\bar{\psi}_i(\tau)$ y $\psi_i(\tau)$ representan los campos fermiónicos y los números complejos $\bar{e}(\tau)$ y $e(\tau)$ representan los campos bosónicos. Estas ecuaciones pueden escribirse convenientemente en la forma (ver Ec. (3.21))

$$Z = \int \mathcal{D}[\bar{e}, e] d\lambda e^{-\beta F_{eff}}, \quad (\text{B.3})$$

donde

$$F_{eff} = \left[\sum_i \bar{e} \left(\frac{\partial}{\partial \tau} + \lambda \right) e - \lambda - \sum_m \text{Tr} \ln \mathbf{G}_m \right], \quad (\text{B.4})$$

donde F_{eff} es la energía libre *efectiva* donde los los grados de libertad fermiónicos se han integrado suponiendo en una cierta configuración el campo bosónico e , y la matriz de \mathbf{G}_m

para un modo fermiónico de Matsubara $i\omega_n$, está dada por

$$\hat{\mathbf{G}}_m^{-1}(i\omega_n) = i\omega_n \mathbf{1} - \hat{\mathbf{H}}'_m(\lambda)$$

$$= \left[\begin{array}{c|ccc} (i\omega_n - \epsilon_{f,m} - \lambda) & \bar{e}_0 \bar{V}_{k=k_1} & \bar{e}_0 \bar{V}_{k=k_2} & \bar{e}_0 \bar{V}_{k=k_3} & \dots \\ \hline e_0 V_{k=k_1} & (i\omega_n - \epsilon_{k=k_1}) & 0 & 0 & \dots \\ e_0 V_{k=k_2} & 0 & (i\omega_n - \epsilon_{k=k_2}) & 0 & \dots \\ e_0 V_{k=k_3} & 0 & 0 & (i\omega_n - \epsilon_{k=k_3}) & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{array} \right],$$

En la aproximación de campo medio $Z \propto e^{-\beta F_{eff}}$, por lo que hay que minimizar respecto del bosón condensado e_0 y de λ . Usando la identidad de la Ec. (3.26) y las definiciones de las Ecs. (2.7)-(3.31) llegamos a la expresión de la energía libre efectiva de la Ec. (3.32)

$$\Delta F_{eff} = (e_0^2 - 1)\lambda - \frac{1}{\beta} \sum_m \sum_n \ln G_{ff,m}(i\omega_n). \quad (\text{B.5})$$

Derivando con respecto a e_0 y λ se obtienen las Ecs. (3.33) y (3.34). Podemos simplificar las expresiones de $G_{ff,m}$ y $G_{kk,m}$ suponiendo, como es usual, que el parámetro V_k es independiente de k ($V_k = V$), y que los estados de conducción poseen una densidad de estados constante cerca del nivel de Fermi. Para esto último, utilizamos una simplificación usual

$$\sum_k G_{kk,m}^0(z) = \sum_k \frac{1}{z - \epsilon_k} \approx \rho_c \ln \left[\frac{D+z}{D-z} \right], \quad (\text{B.6})$$

que verifica propiedades analíticas de los propagadores de un electrón¹. En esta expresión ρ_c es la densidad de estados en el nivel de Fermi y D es el semiancho de la banda de conducción. Utilizando estas aproximaciones en las Ecs. (3.35) y (3.36) y suponiendo que no hay efectos del campo cristalino ($\epsilon_{f,m} = \epsilon_f$) y que los efectos del borde de la banda son nulos cerca de E_F , se obtiene para la Ec. (3.35)

$$\begin{aligned} 0 &= \frac{\partial \Delta F_{eff}}{\partial e_0}, \\ 0 &= \lambda - \frac{N\rho_c V^2}{\pi} \text{Im} \left[\int_{-\infty}^{\infty} d\omega G_{ff,m}(\omega + i0^+) \left(\ln \left| \frac{D+\omega}{D-\omega} \right| - i\pi\theta(D - |\omega|) \right) \right], \\ &= \lambda + N\rho_c V^2 \text{Re} \left[\int_{-D}^0 d\omega G_{ff,m}(\omega + i0^+) \right], \\ &= \lambda + N\rho_c V^2 \int_{-D}^0 d\omega \frac{\omega - (\epsilon_f + \lambda)}{[\omega - (\epsilon_f + \lambda)]^2 + \tilde{\Gamma}^2}, \\ &= \lambda + \frac{N\rho_c V^2}{2} \ln \left[\frac{(\epsilon_f + \lambda)^2 + \tilde{\Gamma}^2}{(D + \epsilon_f + \lambda)^2 + \tilde{\Gamma}^2} \right] \\ &\approx \lambda + \frac{N\rho_c V^2}{2} \ln \left[\frac{(\epsilon_f + \lambda)^2 + \tilde{\Gamma}^2}{D^2} \right] \end{aligned} \quad (\text{B.7})$$

¹La función de Green de un electrón debe verificar $G(z) \lim_{|z| \rightarrow \infty} \frac{1}{z}$

donde $\tilde{\Gamma} = e_0^2 \Gamma$, y $\Gamma = V^2 \pi \rho_c$ lo habíamos definido en la sección 2.4.1. La Ec. (3.36) queda

$$\begin{aligned}
0 &= \frac{\partial \Delta F_{eff}}{\partial \lambda}, \\
0 &= e_0^2 - \frac{N}{\pi} \text{Im} \left[\int_{-D}^0 d\omega G_{ff,m}(\omega + i0^+) \right] - 1, \\
&= e_0^2 + \frac{N}{\pi} \int_{-D}^0 d\omega \frac{\Gamma}{[\omega - (\epsilon_f + \lambda)]^2 + \Gamma^2} - 1, \\
&= e_0^2 - \frac{N}{\pi} \left\{ \text{tg}^{-1} \left[\frac{\epsilon_f + \lambda}{\Gamma} \right] - \text{tg}^{-1} \left[\frac{D + \epsilon_f + \lambda}{\Gamma} \right] \right\} - 1, \\
&\approx e_0^2 - \frac{N}{\pi} \left\{ \text{tg}^{-1} \left[\frac{\epsilon_f + \lambda}{\Gamma} \right] - \frac{\pi}{2} \right\} - 1, \\
&\approx e_0^2 + \frac{N}{\pi} \text{tg}^{-1} \left[\frac{\Gamma}{\epsilon_f + \lambda} \right] - 1, \tag{B.8}
\end{aligned}$$

y de aquí

$$\epsilon_f + \lambda \approx \frac{\Gamma}{\tan \left[\frac{\pi(1 - e_0^2)}{N} \right]}. \tag{B.9}$$

Para el caso $N = 2$, en el límite de Kondo, la población del bosón $e_0 \rightarrow 0$ y $\epsilon_f + \lambda \rightarrow 0$, con lo cual $\lambda \rightarrow -\epsilon_f$. Reemplazando este resultado en la Ec. (B.7) se obtiene

$$\begin{aligned}
\epsilon_f &\approx N \rho_c V^2 \ln \left(\frac{\tilde{\Gamma}}{D} \right), \\
\frac{\pi \epsilon_f}{N \Gamma} &\approx \ln \left(\frac{\tilde{\Gamma}}{D} \right), \tag{B.10}
\end{aligned}$$

y finalmente de aquí, se obtiene la expresión de la Ec. (3.38)

$$\tilde{\Gamma} \approx D \exp \left[-\frac{\pi |\epsilon_f|}{N \Gamma} \right], \tag{B.11}$$

que es análoga a la Ec. (2.54), y donde $\tilde{\Gamma}$ admite la interpretación de la temperatura de Kondo T_K .

B.1.2 Modelo de Anderson efectivo ($N_d = 4$)

En el caso del mapeo al sitio efectivo del Cap. 5, el formalismo debe extenderse para tratar varios fermiones $f_{j,\sigma}$. En ese caso, resulta más fácil obtener las ecuaciones del *saddle-point* a

partir del teorema de Hellman-Feynman [91, 92]

$$0 = \left\langle \frac{\partial H'_{eff}}{\partial \lambda} \right\rangle = \sum_{j,\sigma} \langle f_{j,\sigma}^\dagger f_{j,\sigma} \rangle + e_0^2 - 1, \quad (\text{B.12})$$

$$0 = \left\langle \frac{\partial H'_{eff}}{\partial e_0} \right\rangle = 2e_0 \left(E_0^{(4)} + \lambda \right) + \sum_{j,\sigma,\eta=0,1} V_j^\eta \langle c_{\eta,2,\sigma}^\dagger f_{j,\sigma} \rangle + \text{H.c.}, \quad (\text{B.13})$$

donde H'_{eff} es el hamiltoniano efectivo de la Ec. (5.33) en el que se han condensado los operadores bosónicos e . Los valores medios se pueden calcular a través del método de la ecuación de movimiento [93]

$$\langle \langle f_{j,\sigma}; f_{j',\sigma}^\dagger \rangle \rangle = \frac{1}{\omega - E_{j,\sigma}^{(3)} - \lambda} \left(\delta_{jj'} + \sum_{\eta} V_{j,\sigma}^\eta \langle \langle c_{\eta,\sigma}; f_{j',\sigma}^\dagger \rangle \rangle \right), \quad (\text{B.14})$$

$$\begin{aligned} \langle \langle c_{\eta,\sigma}; f_{j',\sigma}^\dagger \rangle \rangle &= \frac{1}{\omega - \Sigma_{\eta,\sigma}(\omega)} \sum_{j''} V_{j'',\sigma}^\eta \langle \langle f_{j'',\sigma}; f_{j',\sigma}^\dagger \rangle \rangle, \\ &= \frac{S_{j',\sigma}^\eta}{\omega - \Sigma_{\eta,\sigma}(\omega)}, \end{aligned} \quad (\text{B.15})$$

donde $\Sigma_{\eta,\sigma}(\omega)$ es la autoenergía del propagador de la semicadena en el sitio η : $\langle \langle c_{\eta,\sigma}; c_{\eta,\sigma}^\dagger \rangle \rangle = g_{\eta,\sigma}^{(0)}(\omega) = [\omega - \Sigma_{\eta,\sigma}(\omega)]^{-1}$, y donde se usó la definición

$$S_{j,\sigma}^\eta \equiv \sum_{j'} V_{j',\sigma}^\eta \langle \langle f_{j',\sigma}; f_{j,\sigma}^\dagger \rangle \rangle. \quad (\text{B.16})$$

Reemplazando la Ec. (B.14) en la definición Ec. (B.16)

$$S_{j,\sigma}^\eta = \sum_{j'} \frac{V_{j',\sigma}^\eta}{\omega - E_{j',\sigma}^{(3)} - \lambda} \left(\delta_{j'j} + \sum_{\eta'} V_{j',\sigma}^{\eta'} \langle \langle c_{\eta',\sigma}; f_{j,\sigma}^\dagger \rangle \rangle \right), \quad (\text{B.17})$$

y reemplazando aquí la Ec. (B.15) se obtiene

$$S_{j,\sigma}^\eta = \sum_{j'} \frac{V_{j',\sigma}^\eta}{\omega - E_{j',\sigma}^{(3)} - \lambda} \left(\delta_{j'j} + \sum_{\eta'} V_{j',\sigma}^{\eta'} \frac{S_{j,\sigma}^{\eta'}}{\omega - \Sigma_{\eta',\sigma}(\omega)} \right). \quad (\text{B.18})$$

Resolviendo para $S_{j,\sigma}^\eta$ se obtiene

$$S_{j,\sigma}^1 = \frac{1}{\omega - E_{j,\sigma}^{(3)} - \lambda} \frac{(1 - A_{00}^\sigma(\omega)) \bar{\alpha}_{j,\sigma}^1 + A_{10}^\sigma(\omega) \bar{\alpha}_{j,\sigma}^0}{(1 - A_{00}^\sigma(\omega))(1 - A_{11}^\sigma(\omega)) - A_{10}^\sigma(\omega) A_{01}^\sigma(\omega)}, \quad (\text{B.19})$$

$$S_{j,\sigma}^0 = \frac{1}{\omega - E_{j,\sigma}^{(3)} - \lambda} \frac{(1 - A_{11}^\sigma(\omega)) \bar{\alpha}_{j,\sigma}^0 + A_{01}^\sigma(\omega) \bar{\alpha}_{j,\sigma}^1}{(1 - A_{11}^\sigma(\omega))(1 - A_{00}^\sigma(\omega)) - A_{01}^\sigma(\omega) A_{10}^\sigma(\omega)}, \quad (\text{B.20})$$

donde se definió

$$A_{\eta,\eta'}^\sigma = \delta_{\eta,\eta'} + (-1)^{\eta,\eta'} g_{\eta,\sigma}^{(0)} \sum_m \frac{V_{m,\sigma}^\eta \bar{V}_{m,\sigma}^{\eta'}}{\omega - E_{j,\sigma}^{(3)} - \lambda}. \quad (\text{B.21})$$

Reemplazando las Ecs. (B.21), (B.19) y (B.20) en las Ecs. (B.14) y (B.15), se obtiene la expresión de la Ec. (5.38)

$$g_{i,j}^\sigma = g_{i,j}^{0\sigma} + \frac{e_0^2 V^2 g_{ii}^{0\sigma} g_{jj}^{0\sigma}}{A_{11}^\sigma A_{00}^\sigma - A_{10}^\sigma A_{01}^\sigma} \sum_{\eta,\eta'} \alpha_{i\sigma}^\eta \bar{\alpha}_{j\sigma}^{\eta'} A_{\eta\eta'}^\sigma, \quad (\text{B.22})$$

donde se reemplazó $g_{i,j}^\sigma = \langle\langle f_{i,\sigma}; f_{j,\sigma}^\dagger \rangle\rangle$ y $g_{i,j}^{0\sigma}(\omega) = \delta_{i,j} [\omega - E_{j,\sigma}^{(3)} - \lambda]^{-1}$.

Una vez que tenemos las expresiones para $g_{i,j}^\sigma$, podemos calcular los valores medios de las Ecs. (B.12) y (B.13) y resolver las ecuaciones del *saddle-point* numéricamente. Para facilitar los cálculos numéricos y aumentar la rapidez de convergencia del método, se retienen sólo los primeros 8 estados, de un total de 20 del subespacio $S = 1/2$. Este truncamiento afecta las soluciones numéricas en menos del 1%. Otra aproximación proviene de la función de Green de los contactos, que se aproxima por $g_{\eta,\sigma}^{(0)}(\omega) \approx \rho_c \left[\ln \left| \frac{D+\omega}{D-\omega} \right| - i\pi\theta(D - |\omega|) \right]$.

B.2 Formulación de Kotliar y Ruckenstein

B.2.1 Modelo de Anderson

En el caso del modelo de Anderson con U finito, la función de partición del sistema en la formulación de Kotliar y Ruckenstein se escribe como

$$Z = \int \mathcal{D}[\bar{e}, e] \mathcal{D}[\bar{h}, h] \prod_\sigma \mathcal{D}[\bar{g}_\sigma, g_\sigma] d\lambda_\sigma d\lambda' \exp \left[- \int_0^\beta d\tau F_{eff}(\tau) \right], \quad (\text{B.23})$$

donde $S_{eff}(\tau)$ es la acción efectiva, luego de haber integrado los grados de libertad fermiónicos

$$F_{eff}(\tau) = \left[\bar{e} \left(\frac{\partial}{\partial \tau} + \lambda' \right) e \right] + \sum_\sigma \left[\bar{g}_\sigma \left(\frac{\partial}{\partial \tau} + \epsilon_d + \lambda' - \lambda_\sigma \right) g_\sigma \right] + \left[\bar{h} \left(\frac{\partial}{\partial \tau} + U - 2\epsilon_d + \lambda' - 2\lambda_\sigma \right) h \right] - \lambda' - \frac{1}{\beta} \sum \text{Tr} \ln \mathbf{G}_\sigma, \quad (\text{B.24})$$

y donde la matriz \mathbf{G}_σ (ver Ec. (3.15)), que representa a los grados de libertad fermiónicos integrados, está dada por

$$\mathbf{G}_\sigma^{-1} = \left[\begin{array}{c|ccc} (i\omega_n - \epsilon_d - \lambda) & (\bar{e}g_\sigma + \bar{g}_\sigma h) \bar{V}_{k=k_1} & (\bar{e}g_\sigma + \bar{g}_\sigma h) \bar{V}_{k=k_2} & (\bar{e}g_\sigma + \bar{g}_\sigma h) \bar{V}_{k=k_3} & \dots \\ \hline (e\bar{g}_\sigma + g_\sigma \bar{h}) V_{k=k_1} & (i\omega_n - \epsilon_{k=k_1}) & 0 & 0 & \dots \\ (e\bar{g}_\sigma + g_\sigma \bar{h}) V_{k=k_2} & 0 & (i\omega_n - \epsilon_{k=k_2}) & 0 & \dots \\ (e\bar{g}_\sigma + g_\sigma \bar{h}) V_{k=k_3} & 0 & 0 & (i\omega_n - \epsilon_{k=k_3}) & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{array} \right], \quad (\text{B.25})$$

La función de partición en la aproximación de campo medio se expresa simplemente como

$$Z \propto \exp[-\beta F_{eff}], \quad (\text{B.26})$$

donde se han condensado los grados de libertad bosónicos en la energía libre efectiva, definida como

$$F_{eff} = F_{boson} + F_{fermion}, \quad (\text{B.27})$$

donde

$$F_{boson} = \lambda' \epsilon_0^2 + \sum_{\sigma} (\epsilon_d + \lambda' - \lambda_{\sigma}) g_{\sigma 0}^2 + (U - 2\epsilon_d + \lambda' - 2\lambda_{\sigma}) h_0^2 - \lambda', \quad (\text{B.28})$$

es la parte bosónica de la acción y

$$F_{fermion} = -\frac{1}{\pi} \sum_{\sigma} \text{Im} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega n_F(\omega) \ln \mathbf{G}_{\sigma}(\omega), \quad (\text{B.29})$$

es la contribución fermiónica a la energía libre del problema, análoga a la Ec. (3.17) .

Podemos eliminar la contribución de los electrones de la banda de conducción antes de incorporar la impureza al sistema, definiendo, como en la Ec. (3.32),

$$\Delta F_{fermion} = F_{fermion} - F_{fermion}^0, \quad (\text{B.30})$$

donde

$$F_{fermion}^0 = -\frac{1}{\pi} \sum_{\sigma} \text{Im} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega n_F(\omega) \ln \mathbf{G}_{band,\sigma}^0(\omega), \quad (\text{B.31})$$

es la contribución de los electrones de conducción desacoplados de la impureza a la energía libre, y donde $\mathbf{G}_{band,\sigma}^0$ es la inversa de la parte inferior de la matriz definida en la Ec. (B.25). Ahora podemos usar la relación de la Ec. (3.26) para hallar $\Delta F_{fermion}$ o, alternativamente usando la Ec. (3.19)

$$\Delta F_{fermion} = -\frac{1}{\beta} \sum_{\sigma} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \ln(1 + e^{-\beta\omega}) \Delta \rho_{fermion,\sigma}(\omega), \quad (\text{B.32})$$

La variación en la densidad de estados fermiónica $\rho_{\sigma}(\omega)$ puede expresarse como

$$\Delta \rho_{fermion,\sigma}(\omega) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \text{Tr} [\mathbf{G}_{\sigma}(\omega) - \mathbf{G}_{band,\sigma}^0(\omega)], \quad (\text{B.33})$$

o, usando la relación 7.94 de la Ref.[56]

$$\Delta \rho_{fermion,\sigma} = \frac{1}{\pi} \text{Im} \frac{\partial}{\partial \omega} \ln G_{ff,\sigma}(\omega) \quad (\text{B.34})$$

podemos expresar el cambio en la energía libre fermiónica en términos de la función de Green $G_{ff,\sigma}$. Reemplazando la Ec. (B.34) en la Ec. (B.32), obtenemos la expresión para $\Delta F_{fermion}$

$$\Delta F_{fermion} = -\frac{1}{\pi} \sum_{\sigma} \text{Im} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega n_F(\omega) \ln G_{ff,\sigma}(\omega). \quad (\text{B.35})$$

La expresión de $G_{ff,\sigma}$, obtenida mediante ecuaciones de movimiento, es

$$G_{ff,\sigma}(\omega) = \left[\omega - \epsilon_d - \mu + \lambda_{\sigma} + i\tilde{\Gamma} \right]^{-1}, \quad (\text{B.36})$$

donde $\tilde{\Gamma} = [g_{\sigma 0}^2(e_0 + h_0)^2]\Gamma$.

Encontramos las ecuaciones del *saddle point* minimizando $\Delta F_{eff} = F_{boson} + \Delta F_{fermion}$ respecto de $e_0, h_0, g_{\sigma 0}, \lambda_{\sigma}$ y λ' , a $T = 0$. Utilizando la simetría de spin, se obtiene $g_{\uparrow 0} = g_{\downarrow 0} = g_0$, y consecuentemente $\lambda_{\uparrow} = \lambda_{\downarrow} = \lambda$. Podemos eliminar el bosón e_0^2 mediante la ecuación

$$0 = \frac{\partial \Delta F_{eff}}{\partial \lambda'} \quad (\text{B.37})$$

$$0 = e_0^2 + 2g_0^2 + h_0^2 - 1 \quad (\text{B.38})$$

$$e_0^2 = 1 - 2g_0^2 - h_0^2, \quad (\text{B.39})$$

eliminamos el simultáneamente el multiplicador λ' . De la ecuación de $\partial \Delta F_{eff} / \partial \lambda = 0$, obtenemos

$$0 = \frac{\partial \Delta F_{eff}}{\partial \lambda} \quad (\text{B.40})$$

$$0 = -2g_0^2 - 2h_0^2 - \frac{2}{\pi} \text{Im} \int_{-\infty}^0 d\omega \frac{1}{\omega - (\epsilon_d + \lambda) + i\tilde{\Gamma}}$$

$$g_0^2 + h_0^2 = -\frac{1}{\pi} \left[\text{tg}^{-1} \left(\frac{\omega - (\epsilon_d + \lambda)}{\tilde{\Gamma}} \right) \right]_{-\infty}^0 \quad (\text{B.41})$$

$$\text{tg}^{-1} \left(\frac{\epsilon_d + \lambda}{\tilde{\Gamma}} \right) = \frac{1}{2} - g_0^2 - h_0^2 \quad (\text{B.42})$$

$$\epsilon_d + \lambda = \frac{\tilde{\Gamma}}{\text{tg} [\pi (g_0^2 + h_0^2)]} \quad (\text{B.43})$$

En el caso particular de existir simetría electrón-hueco, se verifica que la ocupación del orbital d es $1/2$, independientemente del valor de U . Utilizando los vínculos en forma exacta $\langle d_{\sigma}^{\dagger} d_{\sigma} \rangle = \langle f_{\sigma}^{\dagger} f_{\sigma} \rangle$, con lo que obtenemos

$$g_0^2 + h_0^2 = \langle f_{\sigma}^{\dagger} f_{\sigma} \rangle = \frac{1}{2}, \quad (\text{B.44})$$

con lo cual podemos eliminar la variable h_0 . Además, en este caso particular, se debe verificar que la ocupación del estado vacío y el doblemente ocupado es la misma. Esto implica $e_0 = h_0$. Con todas estas simplificaciones en el caso simétrico, la función de energía libre depende

solamente de la variable g_0 , $F_{eff} \equiv F_{eff}(g_0)$. Reemplazando la Ec. (B.44) en la Ec.(B.43) se obtiene $\lambda = -\epsilon_d = U/2$. La expresión de la energía libre (Ec. (B.27)) queda, usando la Ec. (B.34) en la Ec. (B.32) e integrando por partes

$$\Delta F_{eff} = -Ug_0^2 + \frac{U}{2} + \frac{2}{\pi} \text{Im} \int_{-\infty}^0 d\omega \ln \left[\omega + i\tilde{\Gamma}(g_0) \right] - F_{fermion}^0. \quad (\text{B.45})$$

Ahora hay que derivar respecto de g_0 esta expresión para encontrar el mínimo de la energía libre

$$0 = \frac{\partial \Delta F_{eff}}{\partial g_0} \quad (\text{B.46})$$

$$0 = 2Ug_0 - \frac{2}{\pi} \text{Im} \left[i \frac{\partial \tilde{\Gamma}}{\partial g_0} \int_{-\infty}^0 \frac{1}{\omega + i\tilde{\Gamma}} d\omega \right] \quad (\text{B.47})$$

$$0 = U - \frac{4(1 - 4g_0^2)\Gamma}{\pi} \int_{-D}^0 \frac{\omega}{\omega^2 + \tilde{\Gamma}^2} d\omega \quad (\text{B.48})$$

$$0 = U - \frac{4(1 - 4g_0^2)\Gamma}{2\pi} \ln \left[\frac{\tilde{\Gamma}^2}{D^2 + \tilde{\Gamma}^2} \right]. \quad (\text{B.49})$$

En el modelo de Anderson simétrico, cuando $U \rightarrow \infty$, la ocupación de los estados vacío e_0^2 y doblemente ocupado h_0^2 tienden a cero, mientras que la del estado simplemente ocupado tiende a $g_0^2 \rightarrow 1/2$. Reemplazando estas aproximaciones en la Ec.(B.49), y despreciando $\tilde{\Gamma}$ frente a D en el logaritmo, se obtiene

$$0 \approx U + \frac{4\Gamma}{\pi} \ln \frac{\tilde{\Gamma}}{D} \quad (\text{B.50})$$

$$\tilde{\Gamma} \approx D \exp \left[-\frac{U\pi}{4\Gamma} \right], \quad (\text{B.51})$$

que es el comportamiento exponencial correcto de T_K para el caso del modelo de Anderson simétrico. Esto permite considerar a la cantidad $\tilde{\Gamma}$ como una estimación de T_K y pone de manifiesto que no es correcto incorporar las raíces en el límite $U \rightarrow \infty$.

B.2.2 Modelo de Anderson efectivo (caso $N_d = 3$)

En el caso del mapeo a un modelo efectivo de impureza del Cap. 4, debe extenderse el formalismo para considerar varios bosones $e_{j,\nu}, h_{j,\nu}$. En este caso, la función de partición del sistema se escribe como

$$Z = \int \prod_{j,\nu} \mathcal{D}[\bar{e}_{j,\nu}, e_{j,\nu}] \prod_{j,\nu} \mathcal{D}[\bar{h}_{j,\nu}, h_{j,\nu}] \prod_{\sigma} \mathcal{D}[\bar{g}_{\sigma}, g_{\sigma}] d\lambda_{\sigma} d\lambda' \exp \left[-\int_0^{\beta} d\tau F_{eff}(\tau) \right], \quad (\text{B.52})$$

donde

$$\begin{aligned}
 F_{eff}(\tau) = & \sum_{j,\nu} \left[\bar{e}_{j,\nu} \left(\frac{\partial}{\partial \tau} + E_{j,\nu}^{(2)} + \lambda' \right) e_{j,\nu} \right] + \sum_{\sigma} \left[\bar{g}_{\sigma} \left(\frac{\partial}{\partial \tau} + E^{(3)} + \lambda' - \lambda_{\sigma} \right) g_{\sigma} \right] + \\
 & + \sum_{\sigma,j,\nu} \left[\bar{h}_{j,\nu} \left(\frac{\partial}{\partial \tau} + E_{j,\nu}^{(4)} - 2E^{(3)} + \lambda' - 2\lambda_{\sigma} \right) h_{j,\nu} \right] - \lambda' - \frac{1}{\beta} \sum_{\nu,\sigma} \text{Tr} \ln \mathbf{G}_{\nu,\sigma},
 \end{aligned} \tag{B.53}$$

y donde la matriz $\mathbf{G}_{\nu,\sigma}$ está dada por

$$[\mathbf{G}_{\nu,\sigma}^{-1}]_{i,j} = \begin{cases} (i\omega_n - \mu) \delta_{i,j} - t_c (\delta_{i,j+1} + \delta_{i+1,j}) & \text{si } i, j \geq 1, \\ (i\omega_n - \mu + E^{(3)} - \lambda_{\sigma}) & \text{si } i = j = 0, \\ V_{\nu,\sigma} & \text{si } (i = 0; j = 1) \text{ o } (i = 1; j = 0). \end{cases}$$

En la última ecuación hemos usado

$$V_{\nu,\sigma} = \sqrt{2}V \left[\bar{g}_{\sigma} \left(\sum_j \alpha_{j,\nu} e_{j,\nu} \right) + \left(\sum_j \beta_{j,\nu} \bar{h}_{j,\nu} \right) g_{\sigma} \right]. \tag{B.54}$$

En la aproximación de campo medio, la diferencia de energía libre debida al acoplamiento con la impureza es

$$\Delta F_{eff} = F_{boson} + \Delta F_{fermion}, \tag{B.55}$$

donde

$$\begin{aligned}
 F_{boson} = & \sum_{j,\nu} \left[(E_{j,\nu}^{(2)} + \lambda') e_{j,\nu}^2 \right] + \sum_{\sigma} \left[(E^{(3)} + \lambda' - \lambda_{\sigma}) g_{\sigma}^2 \right] + \\
 & + \sum_{\sigma,j,\nu} \left[(E_{j,\nu}^{(4)} - 2E^{(3)} + \lambda' - 2\lambda_{\sigma}) h_{j,\nu}^2 \right] - \lambda',
 \end{aligned} \tag{B.56}$$

es la parte bosónica de la acción y

$$\Delta F_{fermion} = -\frac{1}{\pi} \sum_{\sigma} \text{Im} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega n_F(\omega) \ln G_{ff,\sigma} \tag{B.57}$$

es la contribución fermiónica en términos de la función de Green $G_{ff,\sigma}$. Obtenemos $G_{ff,\sigma}$ mediante ecuaciones de movimiento

$$G_{ff,\sigma}(\omega) = \lim_{\eta \rightarrow 0} \left[\omega + i\eta + E^{(3)} - \mu + \lambda_{\sigma} - \sum_{\nu} (|V_{\nu,\sigma}|^2 G_{22,\nu,\sigma}^0(\omega)) \right]^{-1}, \tag{B.58}$$

siendo $G_{22,\nu,\sigma}^0(\omega)$ la función de Green no perturbada en los contactos. Con la aproximación dada en la Ec. (4.35) podemos expresar (despreciando la parte real de $G_{22,\nu,\sigma}^0(\omega)$ y fijando el potencial químico en $\mu = 0$)

$$G_{ff,\sigma}(\omega) = \left[\omega + E^{(3)} + \lambda_{\sigma} + i\tilde{\Gamma} \right]^{-1}, \tag{B.59}$$

donde $\tilde{\Gamma} = \pi\rho_c \sum_{\nu} |V_{\nu,\sigma}|^2$. Suponiendo que el problema es independiente del spin, se verifica $g_{\uparrow} = g_{\downarrow} = g$ y $\lambda_{\uparrow} = \lambda_{\downarrow} = \lambda$. Volviendo a la ecuación (B.57), y derivando respecto de las variables bosónicas condensadas, se obtienen las ecuaciones que minimizan la energía libre efectiva ΔF_{eff}

$$\begin{aligned} 0 &= \frac{\partial \Delta F_{eff}}{\partial e_{j,\nu}}, \\ 0 &= e_{j,\nu} \left(\lambda' + E_{j,\nu}^{(2)} \right) - \\ &\quad - \sum_{\sigma} \frac{\sqrt{2}Vg_{\sigma}}{\pi} \text{Im} \left[V_{\nu,\sigma} \alpha_{j,\nu} \int_{-\infty}^0 d\omega G_{22,\nu,\sigma}^0(\omega) G_{ff,\sigma}(\omega) \right], \end{aligned} \quad (\text{B.60})$$

$$\begin{aligned} 0 &= \frac{\partial \Delta F_{eff}}{\partial h_{j,\nu}}, \\ 0 &= h_{j,\nu} \left(\lambda' + E_{j,\nu}^{(2)} - 2E^{(3)} - \sum_{\sigma} \lambda_{\sigma} \right) - \\ &\quad - \sum_{\sigma} \frac{\sqrt{2}Vg_{\sigma}}{\pi} \text{Im} \left[V_{\nu,\sigma} \alpha_{j,\nu} \int_{-\infty}^0 d\omega G_{22,\nu,\sigma}^0(\omega) G_{ff,\sigma}(\omega) \right], \end{aligned} \quad (\text{B.61})$$

$$\begin{aligned} 0 &= \frac{\partial \Delta F_{eff}}{\partial g_{\sigma}}, \\ 0 &= g_{\sigma} (\lambda' - \lambda_{\sigma}) - \\ &\quad - \frac{\sqrt{2}V}{\pi} \text{Im} \left\{ \sum_{j,\nu} \left[V_{\nu,\sigma} (\alpha_{j,\nu} e_{j,\nu} + \beta_{j,\nu} h_{j,\nu}) \int_{-\infty}^0 d\omega G_{22,\nu,\sigma}^0(\omega) G_{ff,\sigma}(\omega) \right] \right\}, \end{aligned} \quad (\text{B.62})$$

$$\begin{aligned} 0 &= \frac{\partial \Delta F_{eff}}{\partial \lambda'}, \\ 0 &= \sum_{j,\nu} e_{j,\nu}^2 + 2g^2 + \sum_{j,\nu} h_{j,\nu}^2 - 1, \end{aligned} \quad (\text{B.63})$$

$$\begin{aligned} 0 &= \frac{\partial \Delta F_{eff}}{\partial \lambda_{\sigma}}, \\ 0 &= -\frac{\text{Im}}{\pi} \int_{-\infty}^0 d\omega G_{ff,\sigma}(\omega) - g_{\sigma}^2 - \sum_{j,\nu} h_{j,\nu}^2. \end{aligned} \quad (\text{B.64})$$

Podemos ver de las Ecs. (4.26) y (4.27) que $\alpha_{j,\nu} = \beta_{j,\nu}$. Esto surge de la transformación electrón-hueco de la Ec. (4.28), que permite mapear cada uno de los autoestados del subespacio de 2 partículas en otro del subespacio de 4 partículas, mientras que los autoestados del subespacio de 3 partículas se mapean en sí mismos.

A pesar de la gran cantidad de variables (en total son 15), existen relaciones que nos permiten reducir el número de las variables independientes. Usando la ecuación (B.60), podemos expresar a todos los bosones $e_{j,\nu}$ en términos de $e_{0,\nu}$

$$\begin{aligned} e_{j,\nu} &= \frac{\alpha_{j,\nu}}{\alpha_{0,\nu}} \left(\frac{E_{0,\nu}^{(2)} + \lambda'}{E_{j,\nu}^{(2)} + \lambda'} \right) e_{0,\nu}, \\ &= R_{j,\nu}^{(2)} e_{0,\nu}, \end{aligned} \quad (\text{B.65})$$

donde hemos definido

$$R_{j,\nu}^{(2)} \equiv \frac{\alpha_{j,\nu}}{\alpha_{0,\nu}} \left(\frac{E_{0,\nu}^{(2)} + \lambda'}{E_{j,\nu}^{(2)} + \lambda'} \right). \quad (\text{B.66})$$

Con las ecuaciones (B.60) y (B.61) podemos a su vez expresar $h_{j,\nu}$ también en términos de $e_{0,\nu}$

$$\begin{aligned} h_{j,\nu} &= \frac{\alpha_{j,\nu}}{\alpha_{0,\nu}} \left(\frac{E_{0,\nu}^{(2)} + \lambda'}{E_{j,\nu}^{(4)} + \lambda' - 2E^{(3)} - 2\lambda} \right) e_{0,\nu}, \\ &= R_{j,\nu}^{(4)} e_{0,\nu}, \end{aligned} \quad (\text{B.67})$$

con la correspondiente definición de $R_{j,\nu}^{(4)}$

$$R_{j,\nu}^{(4)} \equiv \frac{\alpha_{j,\nu}}{\alpha_{0,\nu}} \left(\frac{E_{0,\nu}^{(2)} + \lambda'}{E_{j,\nu}^{(4)} + \lambda' - 2E^{(3)} - 2\lambda} \right). \quad (\text{B.68})$$

De esta manera, reducimos el número de las variables independientes a cuatro: $\{e_{0,+}, e_{0,-}, \lambda, \lambda'\}$. Volviendo a las ecuación (B.60), podemos escribir

$$0 = e_{0,\nu} \left\{ \left(\lambda' + E_{0,\nu}^{(2)} \right) - 2V^2 s^2 \rho_c \alpha_{0,\nu} \left[\sum_j \left(R_{j,\nu}^{(2)} + R_{j,\nu}^{(4)} \right) \alpha_{j,\nu} \right] \ln \left[\frac{(E^{(3)} + \lambda)^2 + \Gamma^2}{(E^{(3)} + \lambda + D)^2 + \Gamma^2} \right] \right\}, \quad (\text{B.69})$$

donde $\Gamma = \pi \rho_c (|V_-|^2 + |V_+|^2)$. La ecuación (B.64) queda

$$0 = \frac{1}{2} \left[\sum_{j,\nu} e_{0,\nu}^2 \left(\left(R_{j,\nu}^{(2)} \right)^2 - \left(R_{j,\nu}^{(4)} \right)^2 \right) \right] - \frac{1}{\pi} \tan^{-1} \left[\frac{E^{(3)} + \lambda}{\Gamma} \right]. \quad (\text{B.70})$$

Finalmente, la ecuación (B.62) queda

$$0 = 1 + \frac{V^2 \rho_c \left(\sum_\nu \left[\sum_j e_{0,\nu} \alpha_{j,\nu}^{(0)} \left(R_{j,\nu}^{(2)} + R_{j,\nu}^{(4)} \right) \right]^2 \right)}{\lambda' - \lambda} \ln \left(\frac{(E^{(3)} + \lambda)^2 + \Gamma^2}{(E^{(3)} + \lambda + W)^2 + \Gamma^2} \right) \quad (\text{B.71})$$

La ecuación (B.63) ha sido utilizada para expresar el boson g en términos de todas las demás variables independientes del problema. Tenemos entonces un sistema de 4 ecuaciones no lineales acopladas con 4 variables. Técnicamente el problema se resolvió minimizando la suma de los cuadrados de las Ecs. (B.69)-(B.71). Para reducir la complejidad del problema, se comenzó resolviendo las ecuaciones en la situación en que hay simetría electrón-hueco, con lo cual se cumple que $e_{j,\nu} = h_{j,\nu}$, es decir, la población de bosones “empty” es igual a la de “doubly-occupied”. Esta simetría permite eliminar la variable λ , como se ve de igualar las ecuaciones (B.60) y (B.61), obteniéndose $\lambda = E^{(3)}$. Posteriormente, se obtuvieron las soluciones en todo el rango de parámetros apartándose adiabáticamente de la situación simétrica.

Para demostrar que la aproximación de bosones esclavos cumple la regla de suma de Friedel [37], partimos de la Ec. (B.64) y usamos la expresión de $G_{ff,\sigma}$ dada por la Ec. (B.59)

$$\begin{aligned} \langle n_{f,\sigma} \rangle &= g_\sigma^2 + \sum_{j,\nu} h_{j,\nu}^2 \\ &= -\frac{\text{Im}}{\pi} \int_{-\infty}^0 d\omega G_{ff,\sigma}(\omega), \\ &= \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^0 d\omega \frac{\tilde{\Gamma}}{[\omega - (E_d + \lambda)]^2 + \tilde{\Gamma}^2}, \end{aligned} \quad (\text{B.72})$$

y resolviendo una expresión análoga a la Ec. (B.43)

$$E_d + \lambda = \frac{\tilde{\Gamma}}{\text{tg}[\pi \langle n_{f,\sigma} \rangle]}. \quad (\text{B.73})$$

La densidad de estados $\rho_{f,\sigma}$ en el nivel de Fermi es

$$\begin{aligned} \rho_{f,\sigma}(0) &= -\frac{\text{Im}}{\pi} G_{ff,\sigma}(0), \\ &= \frac{1}{\pi} \frac{\tilde{\Gamma}}{(E_d + \lambda)^2 + \tilde{\Gamma}^2}, \\ &= \frac{1}{\pi} \frac{\tilde{\Gamma}}{\tilde{\Gamma}^2 \cot^2(\pi \langle n_{f,\sigma} \rangle) + \tilde{\Gamma}^2}, \\ &= \frac{\sin^2(\pi \langle n_{f,\sigma} \rangle)}{\pi \tilde{\Gamma}}, \end{aligned} \quad (\text{B.74})$$

donde en la penúltima línea se usó el resultado de la Ec. (B.73). Este es el resultado análogo a la Ec. (4.48). Utilizando estos resultados en la Ec. (4.45), se sigue fácilmente que

$$\begin{aligned} G &= \frac{2e^2}{h} [2\pi\rho_c (V_+^2 - V_-^2)]^2 |G_{ff,\sigma}|_{\omega=0}^2, \\ &= \frac{2e^2}{h} \tilde{\Gamma}^2 \times \frac{\sin^2(\pi \langle n_{f,\sigma} \rangle)}{\tilde{\Gamma}^2}, \\ &= \frac{2e^2}{h} \sin^2(\pi \langle n_{f,\sigma} \rangle), \end{aligned} \quad (\text{B.75})$$

es el resultado análogo a la Ec. (4.48).

Apéndice C

Transformación de gauge para una partícula de $S = 1/2$ con interacción spin-órbita de Rashba en un anillo 1D

Vamos a demostrar que el operador de la transformación de gauge $\hat{U}(\varphi)$ tiene la forma dada por la Ec.(5.11). Para ello, partimos de la relación que lo define

$$-i\frac{\partial}{\partial\varphi}\hat{U}(\varphi) = \left(-\frac{\phi}{\phi_0} + \frac{\omega_{so}}{2\Omega}\sigma_r(\varphi)\right)\hat{U}(\varphi), \quad (\text{C.1})$$

Definimos el operador de rotaciones continuas alrededor del eje z (eje perpendicular al plano del anillo) en el espacio de espinores como

$$\hat{R}_z(\varphi) = \exp\left[i\sigma_z\frac{\varphi}{2}\right]. \quad (\text{C.2})$$

Notando que

$$\begin{aligned} \hat{R}_z^{-1}(\varphi)\sigma_x\hat{R}_z(\varphi) &= \left[\cos\frac{\varphi}{2} - i\sigma_z\sin\frac{\varphi}{2}\right]\sigma_x\left[\cos\frac{\varphi}{2} + i\sigma_z\sin\frac{\varphi}{2}\right], \\ &= \cos\varphi\sigma_x + \sin\varphi\sigma_y, \\ &= \sigma_r(\varphi), \end{aligned} \quad (\text{C.3})$$

vemos que el producto de operadores $\hat{R}_z(\varphi)\sigma_r(\varphi)\hat{R}_z^{-1}(\varphi) = \sigma_x$ es independiente de φ . Usando este resultado y volviendo a la Ec.(C.1)

$$\begin{aligned} \hat{R}_z(\varphi)\left(-i\frac{\partial}{\partial\varphi}\hat{U}(\varphi)\right)\hat{R}_z^{-1}(\varphi) &= \hat{R}_z(\varphi)\left(-\frac{\phi}{\phi_0} + \frac{\omega_{so}}{2\Omega}\sigma_r(\varphi)\right)\left(\hat{R}_z^{-1}(\varphi)\hat{R}_z(\varphi)\right)\hat{U}(\varphi)\hat{R}_z^{-1}(\varphi), \\ &= \left(-\frac{\phi}{\phi_0} + \frac{\omega_{so}}{2\Omega}\sigma_x\right)\hat{R}_z(\varphi)\hat{U}(\varphi)\hat{R}_z^{-1}(\varphi). \end{aligned}$$

Definiendo un operador rotado $\hat{U}'(\varphi) = \hat{R}_z(\varphi)\hat{U}(\varphi)\hat{R}_z^{-1}(\varphi)$, la ecuación anterior queda

$$\hat{R}_z(\varphi) \left(-i \frac{\partial}{\partial \varphi} \hat{U}(\varphi) \right) \hat{R}_z^{-1}(\varphi) = \left(-\frac{\phi}{\phi_0} + \frac{\omega_{so}}{2\Omega} \sigma_x \right) \hat{U}'(\varphi). \quad (\text{C.4})$$

Derivando el operador rotado $\hat{U}'(\varphi)$ con respecto a φ tenemos

$$\begin{aligned} \frac{\partial \hat{U}'(\varphi)}{\partial \varphi} &= \frac{\partial}{\partial \varphi} \left(\hat{R}_z(\varphi) \hat{U}(\varphi) \hat{R}_z^{-1}(\varphi) \right) \\ &= \frac{i}{2} \left[\sigma_z, \hat{U}'(\varphi) \right] + \hat{R}_z(\varphi) \left(\frac{\partial}{\partial \varphi} \hat{U}(\varphi) \right) \hat{R}_z^{-1}(\varphi). \end{aligned}$$

Despejando $\hat{R}_z(\varphi) \left(\frac{\partial}{\partial \varphi} \hat{U}(\varphi) \right) \hat{R}_z^{-1}(\varphi) = \frac{\partial \hat{U}'(\varphi)}{\partial \varphi} - \frac{i}{2} \left[\sigma_z, \hat{U}'(\varphi) \right]$ y reemplazando en la Ec.(C.4)

$$-i \frac{\partial \hat{U}'(\varphi)}{\partial \varphi} - \frac{1}{2} \sigma_z \hat{U}'(\varphi) + \frac{1}{2} \hat{U}'(\varphi) \sigma_z = \left(-\frac{\phi}{\phi_0} + \frac{\omega_{so}}{2\Omega} \sigma_x \right) \hat{U}'(\varphi). \quad (\text{C.5})$$

Reordenando

$$i \frac{\partial \hat{U}'(\varphi)}{\partial \varphi} + \left(-\frac{\phi}{\phi_0} + \frac{\omega_{so}}{2\Omega} \sigma_x + \frac{1}{2} \sigma_z \right) \hat{U}'(\varphi) = \frac{1}{2} \hat{U}'(\varphi) \sigma_z. \quad (\text{C.6})$$

Hemos llegado a una ecuación diferencial lineal inhomogénea para el operador $\hat{U}'(\varphi)$. En primer lugar, resolvemos la ecuación homogénea

$$i \frac{\partial \hat{U}'(\varphi)}{\partial \varphi} + \left(-\frac{\phi}{\phi_0} + \frac{\omega_{so}}{2\Omega} \sigma_x + \frac{1}{2} \sigma_z \right) \hat{U}'(\varphi) = 0, \quad (\text{C.7})$$

cuya solución es

$$\hat{U}'(\varphi) = A e^{i \left[-\frac{\phi}{\phi_0} + \frac{\omega_{so}}{2\Omega} \sigma_x + \frac{1}{2} \sigma_z \right] \varphi}. \quad (\text{C.8})$$

Para encontrar la solución de la ecuación inhomogénea, tenemos que generalizar la constante a un operador dependiente de φ , $A \rightarrow \hat{A}(\varphi)$. Como se trata de un operador que, en el caso general, no conmuta con el operador exponencial, debemos tener cuidado con el orden. Vamos a utilizar $\hat{U}'(\varphi) = e^{i \left[-\frac{\phi}{\phi_0} + \frac{\omega_{so}}{2\Omega} \sigma_x + \frac{1}{2} \sigma_z \right] \varphi} \hat{A}(\varphi)$. Reemplazando esta solución en la Ec.(C.6)

$$i \frac{\partial \hat{A}(\varphi)}{\partial \varphi} = \frac{1}{2} \hat{A}(\varphi) \sigma_z, \quad (\text{C.9})$$

cuya solución es $\hat{A}(\varphi) = a e^{-i \sigma_z \frac{\varphi}{2}}$. De esta manera el operador $\hat{U}'(\varphi)$ es

$$\hat{U}'(\varphi) = e^{i \left[-\frac{\phi}{\phi_0} + \frac{\omega_{so}}{2\Omega} \sigma_x + \frac{1}{2} \sigma_z \right] \varphi} e^{-i \sigma_z \frac{\varphi}{2}}, \quad (\text{C.10})$$

donde la constante a se fijó imponiendo la condición inicial $\hat{U}'(0) = \mathbf{1}$. De aca se obtiene la expresión para $\hat{U}(\varphi)$

$$\begin{aligned}\hat{U}(\varphi) &= \hat{R}_z^{-1}(\varphi)\hat{U}'(\varphi)\hat{R}_z(\varphi) \\ &= e^{-i\sigma_z\frac{\varphi}{2}}e^{i\left[-\frac{\phi}{\phi_0}+\frac{\omega_{so}}{2\Omega}\sigma_x+\frac{1}{2}\sigma_z\right]\varphi}.\end{aligned}\tag{C.11}$$

Definiendo el versor $\vec{n}_\theta = (\cos\theta, 0, \sin\theta)$, donde $\theta = \text{tg}^{-1}\omega_{so}/\Omega$ y el ángulo efectivo $\varphi' = \varphi\sqrt{1+(\omega_{so}/\Omega)^2}$, puede expresarse esta última ecuación como

$$\hat{U}(\varphi) = \exp\left[-i\sigma_z\frac{\varphi}{2}\right]\exp\left[i\vec{\sigma}\cdot\vec{n}_\theta\frac{\varphi'}{2}\right]\exp\left[i\frac{\phi}{\phi_0}\varphi\right],\tag{C.12}$$

que es precisamente la expresión para el operador $\hat{U}(\varphi)$ dada en la Ec.(5.11).

Bibliografía

- [1] Bickers, N. E., Cox, D. L. and Wilkins, J. W., *Phys. Rev. B*, **36**, 2036 (1987).
- [2] Goldhaber-Gordon, D., Shtrikman, H., Mahalu, D., Abusch-Magder, D., Meirav, U. and Kastner, M. A., *Nature*, **391**, 156 (1998).
- [3] Goldhaber-Gordon, D., Göres, J., Kastner, M. A., Shtrikman, H., Mahalu, D. and Meirav, U., *Phys. Rev. Lett.*, **81**, 5225 (1998).
- [4] Cronenwet, S. M., Oosterkamp, T. H. and Kouwenhoven, L. P., *Science*, **281**, 540 (1998).
- [5] Madhavan, V. *et al.*, *Science*, **280**, 567 (1998).
- [6] Li, J. *et al.*, *Phys. Rev. Lett.*, **80**, 2893 (1998).
- [7] Knorr, N., Schneider, M. A., Dieker, L., Wahl, P. and Kern, K., *Phys. Rev. Lett.*, **88**, 096804 (2002).
- [8] de Haas, W. J., de Boer, J. H. and van der Berg, G. J., *Physica*, **1**, 1115 (1934).
- [9] Ashcroft, N. W. and Mermin, N. D. *Solid state physics*. Holt, Rinehart and Winston, New York (1976).
- [10] Kondo, J., *Prog. Theor. Phys.*, **32**, 37 (1964).
- [11] Zener, C., *Phys. Rev.*, **81**, 440 (1951).
- [12] Anderson, P. W., *Phys. Rev.*, **124**, 41 (1961).
- [13] Kittel, C. *Quantum Theory of Solids*. Wiley, New York (1987).
- [14] Blundell, S. *Magnetism in Condensed Matter*. Oxford University Press Inc, New York (2001).
- [15] Schrieffer, J. R. and Wolff, P. A., *Phys. Rev.*, **149**, 491 (1966).
- [16] Abrikosov, A. A., *Physics*, **2**, 5 (1965).
- [17] Suhl, H., *Phys. Rev.*, **138**, A515 (1965).

- [18] Nagaoka, Y., *Phys. Rev. A*, **138**, 1112 (1965).
- [19] Mattis, D. C., *Phys. Rev. Lett.*, **19**, 1478 (1967).
- [20] Yosida, K., *Phys. Rev.*, **147**, 223 (1966).
- [21] Varma, S. M. and Yafet, Y., *Phys. Rev. B*, **13**, 2950 (1976).
- [22] Anderson, P. W., Yuval, G. and Hamann, D. R., *Phys. Rev. B*, **1**, 4464 (1970).
- [23] Wilson, K. G., *Rev. Mod. Phys.*, **47**, 773 (1975).
- [24] Nozières, P., *J. Low Temp. Phys.*, **17**, 31 (1974).
- [25] Friedel, J., *Can. J. Phys.*, **34**, 1190 (1956).
- [26] Andrei, N., *Phys. Rev. Lett.*, **87A**, 379 (1980).
- [27] Wiegmann, P. B., *Sov. Phys. JETP Lett.*, **31**, 392 (1980).
- [28] Wiegmann, P. B., *Phys. Lett. A*, **31**, 163 (1981).
- [29] Kawakami, N. and Okiji, A., *Phys. Lett. A*, **86**, 483 (1981).
- [30] Yosida, K. and Yamada, K., *Prog. Theor. Phys.*, **46**, 244 (1970).
- [31] Yosida, K. and Yamada, K., *Prog. Theor. Phys.*, **53**, 1286 (1975).
- [32] Horvatić, B., Šokčević, D. and Zlatić, V., *Phys. Rev. B*, **36**, 675 (1987).
- [33] Read, N. and Newns, D. M., *J. Phys. C*, **16**, 3273 (1983).
- [34] Newns, D. M. and Read, N., *Adv. Phys.*, **36**, 799 (1987).
- [35] Coleman, P., *Phys. Rev. B*, **29**, 3035 (1983).
- [36] Coleman, P., *Phys. Rev. B*, **35**, 5072 (1987).
- [37] Langreth, D. C., *Phys. Rev.*, **150**, 516 (1966).
- [38] Pedrazzini, P. *Estudio comparativo de inestabilidades magnéticas en compuestos de Cerio*. [tesis], Instituto Balseiro, Comisión Nacional de Energía Atómica y Universidad Nacional de Cuyo (2003).
- [39] Ruderman, M. A. and Kittel, C., *Phys. Rev.*, **96**, 66 (1954).
- [40] Simonin, J., *Phys. Rev. B*, **73**, 155102 (2006).
- [41] Andres, K., Graebner, J. and Ott, H. R., *Phys. Rev. Lett.*, **35**, 1779 (1975).
- [42] Doniach, S., *Physica B*, **91**, 231 (1977).
- [43] Parks, R., editor. *Valence Instabilities and Narrow Band Phenomena*. Plenum (1977).

- [44] Mancini, F., editor. *Local moment physics in heavy electron systems*, New York (2002). American Journal of Physics.
- [45] Kouwenhoven, L. and Glazman, L. *Physics World*, p.33 (Enero 2001).
- [46] Manoharan, H. C., Lutz, C. P. and Eigler, D. M., *Nature*, **403**, 512 (2000).
- [47] Porras, D., Fernández-Rossier, J. and Tejedor, C., *Phys. Rev. B*, **63**, 155406 (2001).
- [48] Aligia, A. A., *Phys. Rev. B*, **64**, 121102(R) (2001).
- [49] Aligia, A. A., *Phys. Status Solidi B*, **230**, 415 (2002).
- [50] Lobos, A. and Aligia, A. A., *Phys. Rev. B*, **68**, 035411 (2003).
- [51] Fiete, G. A. and Heller, E. J., *Rev. Mod. Physics*, **75**, 933 (2003).
- [52] Lobos, A. M. *Espejismos cuánticos en corrales circulares*. [tesis de maestría], Instituto Balseiro, Comisión Nacional de Energía Atómica y Universidad Nacional de Cuyo (2002).
- [53] Datta, S. *Electronic Transport in Mesoscopic Systems*. Cambridge University Press, Cambridge (1995).
- [54] Jonker, G. H. and Santen, J. H. Van, *Physica*, **16**, 337 (1950).
- [55] Varma, C. M., *Rev. Mod. Phys.*, **48**, 219 (1976).
- [56] Hewson, A. C. *The Kondo Problem to Heavy Fermions*. Cambridge University Press, Cambridge (1993).
- [57] Falicov, L. M., Hanke, W. and Maple, M. B., editors. *Summary Talk*. North-Holland Publishing Company (1981).
- [58] Falicov, L. M., Hanke, W. and Maple, M. B., editors. *Local Fermi liquid theory of intermediate valence systems*. North-Holland Publishing Company (1981).
- [59] Bickers, N. E., *Rev. Mod. Phys.*, **59**, 845 (1987).
- [60] Vildosola, V. L. *Propiedades electrónicas en compuestos intermetálicos de Ce: Del cálculo de bandas a las interacciones de muchos cuerpos*. [tesis], Centro Atómico Constituyentes, Comisión Nacional de Energía Atómica (2004).
- [61] Mahan, G. D. *Many particle physics*. Plenum, New York (1981).
- [62] Negele, J. W. and Orland, H. *Quantum many particle systems*. Addison Wesley, Reading (1987).
- [63] Kleinert, H. *Path integrals in quantum mechanics, statistics and polymer physics*. World Scientific, Singapore (1990).

- [64] Economou, E. N. *Green's functions in quantum physics*. Springer, Berlin (1983).
- [65] Müller-Hartmann, E., *Z. Phys. B - Condensed Matter*, **57**, 281 (1984).
- [66] Zwicknagl, G., Zevin, V. and Fulde, P., *Z. Phys. B - Condensed Matter*, **79**, 365 (1990).
- [67] Gunnarson, O. and Schönhammer, K., *Phys. Rev. Lett.*, **50**, 604 (1983).
- [68] Gunnarson, O. and Schönhammer, K., *Phys. Rev. B*, **31**, 4815 (1985).
- [69] Gunnarson, O. and Schönhammer, K., *Phys. Rev. B*, **28**, 4315 (1983).
- [70] Moreno, N. O. *et al.*, *Phys. Rev. B*, **71**, 165107 (2005).
- [71] Landau, L. D. and Lifshitz, E. M. *Quantum Mechanics: non-relativistic theory*. Pergamon Press, Oxford (1958).
- [72] Bauer, E. D., Bobev, S., Thompson, J. D., Hundley, M. F., Sarrao, J. L., Lobos, A. and Aligia, A. A., *J. Phys.: Condens. Matter*, **16**, 4025 (2004).
- [73] Lawrence, J. M., Riseborough, P. S., Booth, C. H., Sarrao, J. L., Thompson, J. D. and Osborn, R., *Phys. Rev. B*, **63**, 054427 (2001).
- [74] Rajan, V. T., *Phys. Rev. Lett.*, **51**, 308 (1983).
- [75] Christianson, A. D., Lawrence, J. M., Lobos, A. M., Aligia, A. A., Bauer, E. D., Moreno, N. O., Booth, C. H., Goremychkin, E. A., Sarrao, J. L., Thompson, J. D., Batista, C. D., Trouw, F. R. and Hehlen, M. P., *Phys. Rev. B*, **72**, 081102(R) (2005).
- [76] Murani, A. P., *Phys. Rev. B*, **50**, 9882 (1994).
- [77] Tahvildar-Zadeh, A. N., Jarrell, M. and Freericks, J. K., *Phys. Rev. B*, **55**, R3332 (1997).
- [78] Christianson, A. D., Lawrence, J. M., Lobos, A. M., Aligia, A. A., Bauer, E. D., Moreno, N. O., Goremychkin, E. A., Littrell, K. C., Sarrao, J. L., Thompson, J. D. and Batista, C. D., *Physica B*, **378-380**, 752 (2006).
- [79] Crommie, M. F., Lutz, C. P. and Eigler, E. M., *Science*, **262**, 218 (1993).
- [80] Agam, O. and Schiller, A., *Phys. Rev. Lett.*, **86**, 484 (2001).
- [81] Weissmann, M. and Bonadeo, H., *Physica E*, **10**, 44 (2001).
- [82] Thimm, W. B., Kroha, J. and Delft, J. von., *Phys. Rev. Lett.*, **82**, 2143 (1999).
- [83] Vaugier, L., Aligia, A. A. and Lobos, A.M. (*enviado a Phys. Rev. B*) (2006).
- [84] Barral, M. A., Llois, A. M. and Aligia, A. A., *Phys. Rev. B*, **70**, 035416 (2004).
- [85] Plihal, M. and Gadzuk, J. W., *Phys. Rev. B*, **63**, 085404 (2001).

- [86] Cornaglia, P. S. and Balseiro, C. A., *Phys. Rev. B*, **67**, 205420 (2003).
- [87] Cornaglia, P. S. *Transporte y correlaciones electrónicas en sistemas mesoscópicos*. [tesis], Instituto Balseiro, Comisión Nacional de Energía Atómica y Universidad Nacional de Cuyo (2003).
- [88] Lin, C-Y., Neto, A. H. Castro and Jones, B. A., *Phys. Rev. B*, **71**, 035417 (2005).
- [89] Merino, J. and Gunnarson, O., *Phys. Rev. Lett.*, **93**, 156601 (2004).
- [90] Fradkin, E. *Field theories of condensed matter systems*. Addison Wesley, Redwood City, CA (1991).
- [91] Hellmann, H. *Einführung in die Quantumchemie*, p.285 (1937).
- [92] Feynman, R. P., *Phys. Rev.*, **56**, 340 (1939).
- [93] Zubarev, D. N., *Soviet Physics Uspekhi*, **3**, 320 (1960).
- [94] Elitzur, S., *Phys. Rev. D*, **12**, 3978 (1975).
- [95] Kotliar, G. and Ruckenstein, A. E., *Phys. Rev. Lett.*, **57**, 1362 (1986).
- [96] Merino, J. and Gunnarson, O., *Phys. Rev. B*, **69**, 115404 (2004).
- [97] Manoharan, H. C. (Junio-Julio 2001). PASI Conf., Physics and Technology at the Nanometer Scale, Costa Rica.
- [98] Aligia, A A and Lobos, A. M., *J. Phys.: Condens. Matter*, **17**, S1095 (2005).
- [99] García Calderón, G., *Nucl. Phys. A*, **261**, 130 (1976).
- [100] Abramowitz, M. and Stegun, I. A. *Handbook of mathematical functions : with formulas, graphs and mathematical tables*. Dover, New York (1965).
- [101] Euceda, A., Bylander, D. M. and Kleinman, L., *Phys. Rev. B*, **28**, 528 (1983).
- [102] Újsághy, O., Kroha, J., Szunyogh, and Zawadowski, A., *Phys. Rev. Lett.*, **85**, 2557 (2000).
- [103] Moruzzi, V. L., Janak, J. F. and Williams, A. R. *Calculated Electronic Properties of Metals*. Pergamon, New York (1978).
- [104] Bürgui, L., Jeandupeux, O., Hirstein, A, Brune, H. and Kern, K., *Phys. Rev. Lett.*, **81**, 5370 (1998).
- [105] Jeandupeux, O., Bürgui, L., Hirstein, A, Brune, H. and Kern, K., *Phys. Rev. B*, **59**, 15926 (1999).
- [106] Correa, A., Hallberg, K. and Balseiro, C. A., *Europhys. Lett.*, **58**, 899 (2002).

- [107] Chan, Y. S. and Heller, E. J., *Phys. Rev. Lett.*, **78**, 13 (1997).
- [108] Y. Nisikawa, and Oguri, A., *Phys. Rev. B*, **73**, 125108 (2006).
- [109] Büsser, C. A., Moreo, A. and Dagotto, E., *Phys. Rev. B*, **70**, 035402 (2004).
- [110] Oguri, A., *Phys. Rev. B*, **63**, 115305 (2001).
- [111] Gaudreau, L., Studenikin, A., Sachrajda, A. S., Zawadzki, P., Kam, A., Lapointe, J., Korkusinski, M. and Hawrylak, P., *Phys. Rev. Lett.*, **97**, 036807 (2006).
- [112] Aligia, A. A., *Phys. Rev. Lett.*, **96**, 096804 (2006).
- [113] Jamneala, T., Madhavan, V. and Crommie, M. F., *Phys. Rev. Lett.*, **87**, 256804 (2001).
- [114] Landauer, R., *IBM J. Res. Dev.*, **1**, 233 (1957).
- [115] Meir, Y. and Wingreen, N. S., *Phys. Rev. Lett.*, **68**, 2512 (1992).
- [116] Izumida, W., Sakai, O. and Suzuki, S., *J. Phys. Soc. Jpn.*, **70**, 1045 (2001).
- [117] Lobos, A. M. and Aligia, A. A., *Phys. Rev. B*, **74**, 165417 (2006).
- [118] Campo Jr., V. L. and Oliveira, L. N., *Phys. Rev. B*, **68**, 035337 (2003).
- [119] Aligia, A. A. and Proetto, C. R., *Phys. Rev. B*, **65**, 165305 (2002).
- [120] Žitko, R. and Bonča, J., *Phys. Rev. B*, **73**, 035332 (2006).
- [121] Lazarovits, B., Simon, P., Zaránd, G. and Szunyogh, L., *Phys. Rev. Lett.*, **95**, 077202 (2005).
- [122] Ingersent, K., Ludwig, A. W. W. and Affleck, I., *Phys. Rev. Lett.*, **95**, 257204 (2005).
- [123] Aharonov, Y. and Bohm, D., *Phys. Rev.*, **115**, 485 (1959).
- [124] König, M. *et al.*, *Phys. Rev. Lett.*, **96**, 076804 (2006).
- [125] Bergsten, T. *et al.*, *Phys. Rev. Lett.*, **97**, 196803 (2006).
- [126] Aronov, A. G. and Sharvin, Yu. V., *Rev. Mod. Phys.*, **59**, 755 (1987).
- [127] Ji, Y., Heiblum, M., Sprinzak, D., Mahalu, D. and Shtrikman, H., *Science*, **290**, 779 (2000).
- [128] van der Wiel, W. G., De Franceschi, S., Fujisawa, T., Elzerman, J. M., Tarucha, S. and Kouwenhoven, L. P., *Science*, **289**, 2105 (2000).
- [129] Berry, M., *Proc. R. Soc. Lond. A*, **392**, 45 (1984).
- [130] Aharonov, Y. and Anandan, J., *Phys. Rev. Lett.*, **58**, 1593 (1987).

-
- [131] Molnár, B., Peeters, F. M. and Vasilopoulos, P., *Phys. Rev. B*, **69**, 155335 (2004).
- [132] Frustaglia, D. and Richter, K., *Phys. Rev. B*, **69**, 235310 (2004).
- [133] Kovalev, A. A. *et al. cond-mat/0701534* (2007).
- [134] Jagla, E. A. and Balseiro, C. A., *Phys. Rev. Lett.*, **70**, 639 (1993).
- [135] Aligia, A. A. *et al.*, *Phys. Rev. Lett.*, **93**, 076801 (2004).
- [136] Hallberg, K. *et al.*, *Phys. Rev. Lett.*, **93**, 067203 (2004).
- [137] Meijer, F. E., Morpurgo, A. F. and Klapwijk, T. M., *Phys. Rev. B*, **66**, 033107 (2002).
- [138] Meir, Y., Gefen, Y. and Entin-Wohlman, O., *Phys. Rev. Lett.*, **63**, 798 (1989).
- [139] Fetter, A. L. and Walecka, J. D. *Quantum theory of many-particle systems*. McGraw-Hill, New York (1971).
- [140] Nitta, J., Meijer, F. E. and Takayanagi, H., *Appl. Phys. Lett.*, **75**, 695 (1999).

Agradecimientos

Ahora que estoy a punto imprimir esta tesis, se me cruzan muchos pensamientos de gratitud hacia demasiadas personas, y la verdad que no sé muy bien cómo ordenarlos ni cómo expresarlos. Todas esas personas se han ido tejiendo en ese entramado que me permite estar hoy aquí, escribiendo esto. Aunque se me escapen muchos del recuerdo ahora, no quiero dejar de demostrar mi agradecimiento a quienes con su ayuda, con su ejemplo, con un abrazo o simplemente con algunas palabras, se transformaron en parte de mi vida.

En primer lugar quiero agradecer a instituciones que son pilares del desarrollo científico en el Argentina, CONICET y CNEA. Ellas me dieron la oportunidad de acceder a esta beca de doctorado cofinanciada, con la que he podido materializar esta tesis. Me siento sumamente orgulloso de ser parte de ellas y de poder colaborar al esfuerzo que realizan para hacer ciencia en la Argentina. Quiero reconocer también a la Universidad Pública y Gratuita de la Argentina, que a pesar de tantas crisis a lo largo de tantos años, ha sabido subsistir y seguir siendo una fuente de primer nivel para la generación de conocimiento y de recursos humanos. En particular, por ser mendocino, quiero agradecer a la Universidad Nacional de Cuyo y a la Facultad de Ingeniería, donde hice mis primeros años universitarios. Y por supuesto, a este querido Instituto Balseiro, que me dió tantas oportunidades y donde aprendí tantas cosas.

Muy especialmente quiero agradecer a mi director, Armando Aligia, un excelente físico que me guió pacientemente (muy pacientemente, por cierto) a través de estos años de maestría y doctorado, y que no sólo supo transmitirme conocimientos, sino también sabiduría y valores. Mi experiencia bajo su tutela no podría haber sido mejor. Más allá de eso, Armando, te hago acordar acá que me debés esa salida en kayak, que algún momento (cuando no haya viento) te la cobraré.

A la miembros del grupo de Sólidos: Mingo, Cecilia, Karen, César, Gonzalo, Jorge, Majo, Carlos, etc., de quienes aprendí muchísimo, ya que prácticamente todos fueron mis profesores, quiero agradecerles sus enseñanzas y la mano que me tendieron más de una vez. Y no me quiero olvidar de mis colegas becarios de Sólidos, ni de los ex-becarios que pasaron por acá: Seba, Claudio, Misael, Marco, Tomás, Andrés, etc., por sus consejos, su ayuda y sobre todo, su compañerismo.

A las secretarias del Instituto: Marcela, Ana María, Sonia, Marta, Mariana, Carina y Renata, principalmente por su calidez como personas, y por estar siempre dispuestas a ayudar. También hago el merecido reconocimiento a las secretarias de Despacho, Personal, y a nuestra secretaria de Sólidos, Ana Emilia.

A mis amigos de IB99 que todavía quedan en Bariloche, Santiago y Axel, a los que quiero reconocerles el haber estado siempre en mis momentos más difíciles y también por haber sido

parte de mis alegrías a lo largo de muchos años. A Santiago (“el Riga”) le agradezco el ser un compañero de oficina ejemplar, el haberme enseñado cosas de C (entre muchas otras) que sinceramente no hubiera podido aprender solo jamás, y por supuesto por estar siempre listo para cebar su mate forrado en cuero de carpincho, que es ya como un símbolo de esta oficina.

No encuentro palabras para agradecer a mi familia. Más allá de los lazos obvios que nos unen, los considero gente maravillosa a cada uno de ellos, y a medida que crezco y los conozco en otras circunstancias y con otros ojos, los admiro cada vez más. Gracias por ser lo que son, no cambien nunca.

No pueden faltar mis agradecimientos a mi nueva familia de Bariloche, Susana y Marcelo, a quienes les guardo un cariño entrañable por haberme hecho ese lugarcito en sus vidas y por considerarme uno más de su familia, más allá de lo que digan los papeles.

Y a vos, mi negrita, te vine guardando para el final. Desde que llegaste a mi vida, la llenaste, la iluminaste y la hiciste crecer. Cuando las cosas se me pusieron difíciles, me diste motivos para seguir adelante, y me demostraste siempre que sos mi compañera incondicional en este camino incierto que es la vida. Mi amor, nunca voy a terminar de agradecerte por ese amor profundo y sincero que me das, a cada instante, en cada pequeño detalle. Gracias por ser la persona hermosa que sos, y por dejarme compartir mi vida a tu lado.

Publicaciones

1. **“Specific heat of magnetic Ce alloys within a two-component model”**, A.M. Lobos, A.A. Aligia y J.G. Sereni, Eur. Phys. J. B **41**, 289 (2004).
2. **“Intermediate valence behaviour in the new Kondo lattice compound $\text{Yb}_3\text{Ni}_5\text{Al}_{19}$ ”**, E.D. Bauer, S. Bobev, J.D. Thompson, M.F. Hundley, J.L. Sarrao, A. Lobos y A.A. Aligia, Journal of Physics: Condensed Matter **16**, 4025 (2004).
3. **“Crystal-field effects in the mixed-valence compounds $\text{Yb}_2\text{M}_3\text{Ga}_9$ ($\text{M}=\text{Rh},\text{Ir}$)”**, N. O. Moreno, A. Lobos, A. A. Aligia, E. D. Bauer, S. Bobev, V. Fritsch, J. L. Sarrao, P. G. Pagliuso, J.D. Thompson, C. D. Batista, y Z. Fisk, Phys. Rev. B **71**, 165107 (2005).
4. **“Ordering temperature and thermodynamic properties of Kondo systems”**, A. M. Lobos y A. A. Aligia, phys. stat. sol. (c) **2**, No. 10, 3564 (2005).
5. **“Anisotropic intermediate valence in $\text{Yb}_2\text{M}_3\text{Ga}_9$ ($\text{M}=\text{Rh},\text{Ir}$)”**, A. D. Christianson, J. M Lawrence, A. M. Lobos, A. A. Aligia, E. D. Bauer, N. O. Moreno, C. H. Booth, E. A. Goremychkin, J. L. Sarrao, J.D. Thompson, C. D. Batista, F. R. Trouw y M. P. Hehlen, Phys. Rev. B **72**, 081102(R) (2005).
6. **“Mirages and many-body effects in quantum corrals”**, A. A. Aligia y A. M. Lobos, Journal of Physics: Condensed Matter **17** S1095, (2005).
7. **“Theory of eigenvalues for periodic non-stationary Markov processes: the Kolmogorov operator and its applications”**, M. O. Cáceres y A. M. Lobos, Journal of Physics A: Mathematical and General **39** 1547, (2006).
8. **“Anisotropic intermediate valence in $\text{Yb}_2\text{Rh}_3\text{Ga}_9$ ”**, A. D. Christianson, J. M Lawrence, A. M. Lobos, A. A. Aligia, E. D. Bauer, N. O. Moreno, E. A. Goremychkin, K.C. Littrell, J. L. Sarrao, J.D. Thompson y C. D. Batista, Physica B **378-380**, 752 (2006).
9. **“Conductance through an array of quantum dots”**, A. M. Lobos y A. A. Aligia (cond-mat/0609395), Phys. Rev. B **74**, 165417 (2006).
10. **“Theory of polariton-mediated Raman scattering in microcavities”**, L. M. León Hilario, A. Bruchhausen, A. M. Lobos y A. A. Aligia, J. Phys.: Condens. Matter **19**,176210 (2007).