



UNIVERSIDAD NACIONAL DE COLOMBIA

Aproximación atómica para el modelo de Anderson: Caso de U finito

TESIS DE GRADO EN CIENCIAS-FÍSICA

**Aproximación atómica para el modelo de Anderson:
Caso de U finito**

LUIS ALEJANDRO DUEÑAS BULLA
Código: 25161417

Trabajo de grado presentado para optar por el título de:
Pregrado en Ciencias - Física

Director:
Dr. Roberto E. Franco Peñaloza

Universidad Nacional de Colombia
Facultad de Ciencias, Departamento de Física
Grupo de Sistemas Correlacionados
Bogotá D.C., Colombia
2022

The teacher who is indeed wise does not bid you to enter the house of his wisdom but rather leads you to the threshold of your mind.

Kahlil Gibran

Agradecimientos

A mi madre Rosa Elvira Bulla por apoyarme durante estos años y momentos difíciles de mi vida y a mi padre José Aquiles Dueñas que me enseñó que del afán solo queda el cansancio. Expreso mis mas sinceros agradecimientos al profesor Roberto Franco Peñaloza, director de este trabajo, por todo su apoyo, paciencia y sus enseñanzas en este camino de aprendizaje y conocimiento.

Resumen

En este trabajo se estudia y reproducen los resultados de aplicar la aproximación atómica al modelo de la impureza de Anderson, descritos en el artículo[1]. Esta técnica permite describir la transición desde el límite de acoplamiento débil hasta el límite de acoplamiento fuerte. En esta aproximación se asume que el ancho de la banda de conducción se reduce a cero, es decir a un único nivel, obteniéndose un "dímero" entre el estado localizado y el nivel donde se "colapsa" la banda, en este límite el hamiltoniano puede ser resuelto analíticamente, obteniendo 16 autoestados y 16 autovalores; empleando el formalismo de Zubarev para funciones de Green se calcula de manera analítica y exacta (en este caso límite) la autoenergía asociada al modelo, la aproximación consiste en emplear esta autoenergía en el cálculo de la función de Green para el caso general. Al "colapsar" la banda de conducción a un único nivel, se debe de escoger que valor adopta este parámetro, se elige este, exigiendo la satisfacción de la regla de suma de Friedel, que garantiza la descripción de un proceso de dispersión cuántica que satisfaga los principios de conservación. Se obtienen la densidad de estados en los rangos: punto vacío, valencia intermedia, régimen magnético y de Kondo, luego se calcula la conductancia de un punto cuántico interactuante acoplado a un canal de conducción unidimensional (hilo cuántico).

Palabras clave: Modelo de Anderson, Puntos cuánticos, Funciones de Green.

Abstract

A reproduction of the results obtained applying the atomic approximation for the impurity Anderson model, described in the article [1] was obtained. This approximation permits describe all the coupling limits of the model, from the weak coupling to the strong limit coupling. This approximation employ the hypothesis of "collapse" the conduction band to a single energy level, reducing the system to a "dimer" associated to the localized level in the model and the "collapsed" conduction band level, in this limit condition is possible obtain all the 16 eigen-vectors and eigen-values; employing the Zubarev formalist for Green's functions the self-energy in this limit condition is obtained, the approximation essentially employ this self-energy in order to compute the Green's function in the general model. The value where is "collapsed" the conduction band is obtained demanding the satisfaction of the Friedel's sum rule, that basically "summary" the conservation principles in the quantum scattering process linked to the model. The density of states is computed for all the regimens of the system, the electrical conductance is computed too for an interacting quantum dot side coupled to a quantum wire.

Keywords: Anderson model, Quantum dots, Green's functions

Contenido

Agradecimientos	v
Resumen	vii
1. Introducción	2
2. Modelo atómico para la impureza de Anderson	3
2.1. Efecto Kondo	3
2.2. Modelo de Anderson para la impureza	4
2.3. Aproximación atómica para el modelo de Anderson	5
2.3.1. Regla de suma de Friedel	9
2.3.2. Conductancia de un punto cuantico acoplado a una banda de conduccion	9
2.4. Diagonalización del Hamiltoniano con hibridación local	10
3. Resultados	17
4. Conclusiones	29
A. Apendice	30
Bibliografía	34

Lista de Figuras

2- 1. Resultados del experimento original en oro [9], mostrando un mínimo en la resistividad.	3
2- 2. Punto cuántico acoplado a un canal de conducción [5].	9
3- 1. Densidad de estados para $E_f = -10.0\Delta$, $T = 0.001\Delta$ en función de $U = 20.0\Delta$, 50.0Δ , 100.0Δ , 500.0Δ y ∞	17
3- 2. Detalle de la banda mas baja de la gráfica 3- 1.	18
3- 3. Detalle del pico de Kondo figura 3- 1.	18
3- 4. Densidad de estados $\rho_f(w)$ para $U=1.0\Delta$ y $E_f = -10.0\Delta$ y $T=0.001\Delta$	19
3- 5. Densidad de estados $\rho_f(w)$ para $U=5.0\Delta$ y $E_f = -10.0\Delta$ y $T=0.001\Delta$	19
3- 6. Densidad de estados $\rho_f(w)$ para $U=10.0\Delta$ y $E_f = -10.0\Delta$ y $T=0.001\Delta$	20
3- 7. Densidad de estados $\rho_f(w)$ para $U=15.0\Delta$ y $E_f = -10.0\Delta$ y $T=0.001\Delta$	20
3- 8. Densidad de estados $\rho_f(w)$ para $U=20.0\Delta$ y $E_f = -10.0\Delta$ y $T=0.001\Delta$. Limite simétrico del modelo de Anderson.	21
3- 9. Densidad de estados $\rho_f(w)$ para $U=25.0\Delta$ y $E_f = -10.0\Delta$ y $T=0.001\Delta$	21
3- 10 Densidad de estados en el potencial químico $\rho_f(\mu)$ en función de la energía de correlación U . En el cuadro interior se tiene la densidad de estados de los electrones de conducción en el potencial químico $\rho_c(\mu)$, en función de U	22
3- 11 Número de ocupación total η_f en función de U , para $E_f = -10.0\Delta$ y $T = 0.001\Delta$	23
3- 12 Densidad de estados $\rho_f(w)$ para $U=20.0\Delta$ y $E_f = 5.0\Delta$ y $T=0.001\Delta$	23
3- 13 Densidad de estados $\rho_f(w)$ para $U=20.0\Delta$ y $E_f = 0.0\Delta$ y $T=0.001\Delta$	24
3- 14 Densidad de estados $\rho_f(w)$ para $U=20.0\Delta$ y $E_f = -5.0\Delta$ y $T=0.001\Delta$	24
3- 15 Densidad de estados $\rho_f(w)$ para $U=20.0\Delta$ y $E_f = -15.0\Delta$ y $T=0.001\Delta$	25
3- 16 Densidad de estados $\rho_f(w)$ para $U=20.0\Delta$ y $E_f = -20.0\Delta$ y $T=0.001\Delta$	25
3- 17 Densidad de estados $\rho_f(w)$ para $U=20.0\Delta$ y $E_f = -25.0\Delta$ y $T=0.001\Delta$	26
3- 18 Densidad de estados en el potencial químico en función de E_f , para $U = 20.0\Delta$ y $T = 0.001\Delta$	26
3- 19 Número de ocupación total η_f en función de la energía del estado localizado E_f , con $U = 20.0\Delta$ y $T = 0.001\Delta$	27
3- 20 Conductancia del punto cuántico acoplado a la banda de conducción, para $U=20.0\Delta$ y $T=0.001\Delta$	28

1. Introducción

En 1930 Meissner y Voigt midieron la resistividad de varios metales, como Mo, Mg y Mg, la cual aumentaba su valor a bajas temperaturas (4.2 K - 1.3 K) y encontraron que este fenómeno se debía a impurezas magnéticas disueltas en los metales [10].

Los fermiones pesados son sistemas metálicos compuestos por elementos de tierras raras, los cuales poseen momentos magnéticos localizados bien definidos, debido a que tienen los niveles 4f incompletos con una valencia fija (2 o 3) [2].

Los puntos cuánticos son estructuras semiconductoras de unos cuantos nanómetros que pueden transportar electrones, donde la función de onda del electrón está confinada en las tres direcciones por las barreras de potencial que forman la frontera del punto cuántico, estos sistemas se comportan como un solo átomo cuyo espectro de energía es discreto [3].

En este trabajo se aplica la aproximación atómica al modelo de la impureza de Anderson con repulsión de Coulomb finita. En el capítulo 2 se presenta el efecto Kondo, un resumen de las ecuaciones del formalismo de la aproximación atómica, la obtención analítica de los 16 autovalores y autovectores en el límite cuando el ancho de la banda de conducción es cero con hibridación local. En el capítulo 3 se presentan los resultados, el cálculo de la densidad de estados, números de ocupación y la conductancia del punto cuántico. En el capítulo 4 se exponen las conclusiones, por último se detallan aspectos del cálculo realizado en el apéndice.

2. Modelo atómico para la impureza de Anderson

2.1. Efecto Kondo

En 1934 en el laboratorio de Kamerling Onnes en Holanda, G.J. van dën, J. de Boer and W. J. de Haas Berg, descubrieron que la curva de resistencia del oro con impurezas presentaba un mínimo a temperaturas muy bajas $\sim 4K$ [9], ver figura 2- 1. En ese momento la resistividad se explicaba por medio de la regla de Matthiessen, dispersión de los electrones debido a los fonones y las impurezas, se esperaba que la resistividad decreciera monótonamente con la temperatura. Este fenómeno fue descubierto en varios metales, se sabía que este mínimo estaba asociado con impurezas pero años mas tarde se descubrió que las impurezas debían ser magnéticas [7].

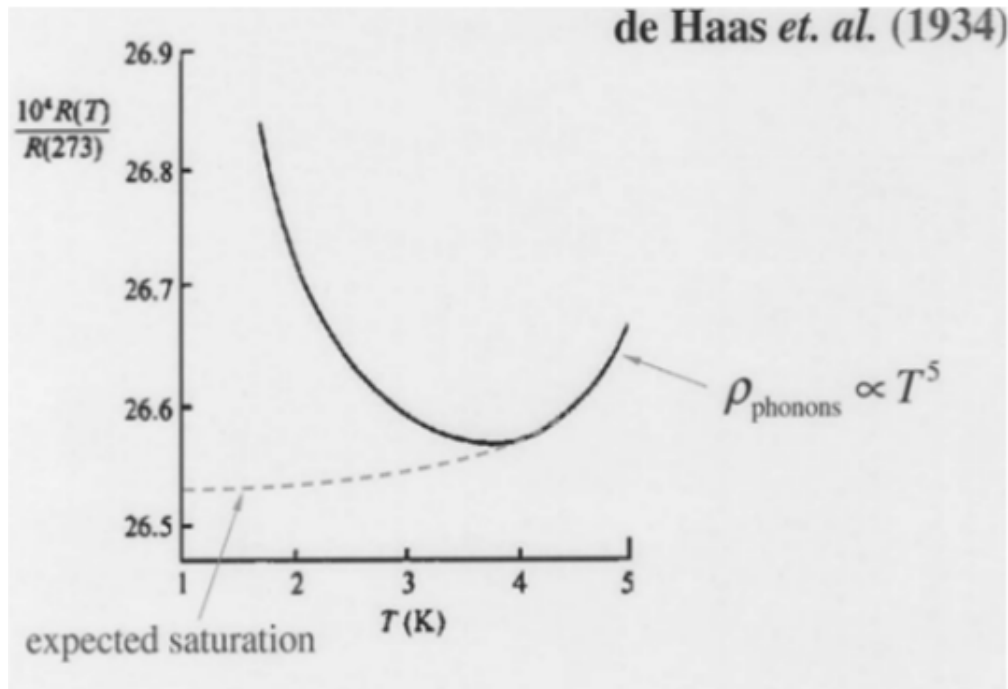


Figura 2- 1.: Resultados del experimento original en oro [9], mostrando un mínimo en la resistividad.

Tomo alrededor de 30 años explicar la teoría detrás de este fenómeno. En 1964, Jun Kondo mostró que un proceso de dispersión de los electrones alternativo estaba tomando lugar, a temperaturas de unos cuantos Kelvin, las impurezas magnéticas dan origen a un proceso de dispersión que involucra un intercambio temporal del estado del spin entre los electrones de conducción y la impureza magnética. Kondo descubrió que usando teoría de perturbaciones al modelo de la dispersión cuando las impurezas magnéticas interactúan con los spins de los electrones de conducción, el segundo termino en el calculo puede ser mas grande que el primero, originando un incremento logarítmico en la resistencia de un metal cuando la temperatura decrece [4]. La resistencia en un metal esta descrita por:

$$\rho(T) = c\rho_0 + aT^5 - c\rho_1 \ln(T) \quad (2-1)$$

El primer termino describe la resistencia residual, el segundo termino debido a las vibraciones de la red y el tercer termino descubierto por Kondo. El mínimo en la resistividad ocurre en:

$$T_K = \left(\frac{\rho_1}{5a}\right)^{\frac{1}{5}} c^{\frac{1}{5}} \quad (2-2)$$

2.2. Modelo de Anderson para la impureza

El modelo de Anderson permite resolver el problema de las impurezas magnéticas inmersas en un metal que producen el efecto Kondo, lo cual no puede ser explicado usando la teoría de bandas. En 1961 Anderson propone que la correlación coulombiana entre los electrones de las capas internas de la impureza originan momentos magnéticos localizados [1]. El Hamiltoniano de Anderson se expresa asi [8]:

$$H = \sum_{\vec{k},\sigma} E_{\vec{k}} C_{\vec{k},\sigma}^{\dagger} C_{\vec{k},\sigma} + \sum_{j,\sigma} E_{f,\sigma} f_{j,\sigma}^{\dagger} f_{j,\sigma} + U \sum_j n_{j,\sigma} n_{j,\bar{\sigma}} + H_h \quad (2-3)$$

$$H_h = \sum_{j,\vec{k},\sigma} \left(V_{j,\vec{k},\sigma} f_{j,\sigma}^{\dagger} C_{\vec{k},\sigma} + V_{j,\vec{k},\sigma}^* C_{\vec{k},\sigma}^{\dagger} f_{j,\sigma} \right) \quad (2-4)$$

Donde $C_{\vec{k},\sigma}^{\dagger}$, $C_{\vec{k},\sigma}$ son los operadores de creación y destrucción de los electrones en la banda de conducción, $f_{j,\sigma}^{\dagger}$, $f_{j,\sigma}$ son los operadores de creación y destrucción de los electrones en la impureza y $n_{j,\sigma} = f_{j,\sigma}^{\dagger} f_{j,\sigma}$. E_k es la energía de los electrones en la banda, E_f la energía de los electrones en la impureza, U la energía de repulsión entre los electrones del estado localizado y $V_{j,k,\sigma}$, $V_{j,k,\sigma}^*$ la hibridización para que los electrones pasen del estado localizado a la banda y viceversa.

La hibridización se expresa como:

$$V_{j,\vec{k},\sigma} = \frac{1}{\sqrt{N_s}} V_{\sigma}(\vec{k}) e^{(i\vec{k} \cdot \vec{R}_j)} \quad (2-5)$$

Usando los operadores de Hubbard $X_{j,\alpha\beta}^\dagger = |j, \beta\rangle\langle j, \alpha|$ que transforman el estado $|\alpha\rangle$ del sitio j al estado $|\beta\rangle$ del mismo sitio, al realizar un cambio de base a estos operadores 2-3 queda:

$$H = \sum_{k,\sigma} E_{k,\sigma} C_{k,\sigma}^\dagger C_{k,\sigma} + \sum_{\sigma,j} E_{f,\sigma} X_{j,\sigma\sigma} + \sum_j (E_{f,\sigma} + U) X_{j,dd} + H_h \quad (2-6)$$

$$H_h = \sum_{jba,\mathbf{k}\sigma} \left(V_{jba,\mathbf{k}\sigma} X_{j,ba}^\dagger C_{\mathbf{k}\sigma} + V_{jba,\mathbf{k}\sigma}^* C_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger X_{j,ba} \right) \quad (2-7)$$

Como U es finito existen 4 posibles estados de ocupación $|0\rangle$ (vacío), $|+\rangle$ (up), $|-\rangle$ (down) y $|d\rangle = |+-\rangle$ (doble ocupación). La relación de identidad, en el sitio j :

$$X_{j,00} + X_{j,\sigma\sigma} + X_{j,\bar{\sigma}\bar{\sigma}} + X_{j,dd} = I \quad (2-8)$$

Los números de ocupación de la impureza, $n_{f,a} = \langle X \rangle$, cumplen la relación de completez:

$$n_{j,0} + n_{j,\sigma} + n_{j,\bar{\sigma}} + n_{j,d} = 1 \quad (2-9)$$

2.3. Aproximación atómica para el modelo de Anderson

En general la ecuación 2-3 no tiene solución analítica por lo que se recurre a métodos numéricos, sin embargo en el caso cuando el límite de la banda de conducción es cero, la hidridización es local (no depende de k), se puede diagonalizar analíticamente el hamiltoniano obteniendo 16 autoestados y 16 autovectores (Apéndice A). Un desarrollo completo del formalismo de las función de Green y la aproximación atómica se puede consultar en [6].

Las funciones de Green que describen la impureza están dadas por la ecuación de Dyson:

$$G_\sigma^{ff} = M_\sigma \cdot (I - A_\sigma)^{-1} ; \quad A_\sigma = W_\sigma \cdot M_\sigma \quad (2-10)$$

Las cuales forman una matriz:

$$G^{ff} = \begin{pmatrix} G_\uparrow^{ff} & 0 \\ 0 & G_\downarrow^{ff} \end{pmatrix} \quad (2-11)$$

Donde:

$$M_\sigma = (I + G_\sigma^{ff} \cdot W_\sigma)^{-1} \cdot G_\sigma^{ff} \quad (2-12)$$

$$W_\uparrow(k, z) = |V|^2 g_{c,\uparrow}^0(k, z) I \quad (2-13)$$

$$W_\downarrow(k, z) = |V|^2 g_{c,\downarrow}^0(k, z) I' \quad (2-14)$$

$$g_{c,\sigma}^0(k, z) = \frac{-1}{z - \epsilon(k, \sigma)} \quad (2-15)$$

Con:

$$I = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \quad I' = \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix} \quad (2-16)$$

La matriz M_σ se expresa por medio de los cumulantes que indican todos los procesos de dispersión.

$$M_\uparrow = \begin{pmatrix} m_{11} & m_{13} \\ m_{31} & m_{33} \end{pmatrix} \quad (2-17)$$

$$M_\downarrow = \begin{pmatrix} m_{22} & m_{24} \\ m_{42} & m_{44} \end{pmatrix} \quad (2-18)$$

Despejando G_σ^{ff} en 2-10:

$$\begin{aligned} G_\uparrow^{ff} &= \begin{pmatrix} G_{11}^{ff} & G_{13}^{ff} \\ G_{31}^{ff} & G_{33}^{ff} \end{pmatrix} \\ &= \frac{\begin{pmatrix} m_{11} & m_{13} \\ m_{31} & m_{33} \end{pmatrix} - |V|^2 \varphi_\uparrow(iw)(m_{11}m_{33} - m_{13}m_{31}) \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix}}{1 - |V|^2 \varphi_\uparrow(iw)(m_{11} + m_{33} + m_{13} + m_{31})} \end{aligned} \quad (2-19)$$

$$\begin{aligned} G_\downarrow^{ff} &= \begin{pmatrix} G_{22}^{ff} & G_{24}^{ff} \\ G_{42}^{ff} & G_{44}^{ff} \end{pmatrix} \\ &= \frac{\begin{pmatrix} m_{22} & m_{24} \\ m_{42} & m_{44} \end{pmatrix} - |V|^2 \varphi_\downarrow(iw)(m_{22}m_{44} - m_{24}m_{42}) \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}}{1 - |V|^2 \varphi_\downarrow(iw)(m_{22} + m_{44} - m_{24} - m_{42})} \end{aligned} \quad (2-20)$$

φ_σ es la función de Green para la banda de conducción descrita como una banda cuadrada de ancho D, en el intervalo $[A, B]$. μ es el potencial químico.

$$\varphi_\sigma(z) = \frac{1}{2D} \ln\left(\frac{z - B + \mu}{z - A + \mu}\right) \quad (2-21)$$

De manera analoga se pueden encontrar las funciones de Green de los electrones de conducción G_σ^{cc} y las cruzadas G_σ^{cf} .

$$\begin{aligned} G_\uparrow^{cc}(k, k', iw) &= g_{c,\uparrow}^0(k, iw) \delta(k, k') + \frac{|V|^2}{N_s} g_{c,\uparrow}^0(k, iw) \times \\ &\quad \frac{m_{11} + m_{33} + m_{13} + m_{31}}{1 - |V|^2 \varphi_\uparrow(iw)(m_{11} + m_{33} + m_{13} + m_{31})} \times g_{c,\uparrow}^0(k', iw) \end{aligned} \quad (2-22)$$

$$\begin{aligned} G_\downarrow^{cc}(k, k', iw) &= g_{c,\downarrow}^0(k, iw) \delta(k, k') + \frac{|V|^2}{N_s} g_{c,\downarrow}^0(k, iw) \times \\ &\quad \frac{m_{22} + m_{44} - m_{24} - m_{42}}{1 - |V|^2 \varphi_\downarrow(iw)(m_{22} + m_{44} - m_{24} - m_{42})} \times g_{c,\downarrow}^0(k', iw) \end{aligned} \quad (2-23)$$

La funcion de Green cruzada:

$$G_{\sigma}^{cf} = (G_{0\sigma,\sigma}^{cf}, G_{\sigma d,\sigma}^{cf}) \quad (2-24)$$

$$G_{\uparrow}^{cf}(k, iw) = -\frac{V}{\sqrt{N_s}} g_{c,\uparrow}^0(k, iw) \times \frac{(m_{11} + m_{31}, m_{13} + m_{33})}{1 - |V|^2 \varphi_{\uparrow}(iw)(m_{11} + m_{33} + m_{13} + m_{31})} \quad (2-25)$$

$$G_{\downarrow}^{cf}(k, iw) = -\frac{V}{\sqrt{N_s}} g_{c,\downarrow}^0(k, iw) \times \frac{(m_{22} - m_{42}, m_{24} - m_{44})}{1 - |V|^2 \varphi_{\downarrow}(iw)(m_{22} + m_{44} - m_{24} - m_{42})} \quad (2-26)$$

Para calcular los cumulantes M_{σ} se analizan las funciones de Green del modelo atómico, en donde se sabe la solución exacta de las GF:

$$G_{\sigma}^{ff,at} = M_{\sigma}^{at} \cdot (I - W_{\sigma}^0 \cdot M_{\sigma}^{at})^{-1} \quad (2-27)$$

De esta ecuación se pueden calcular los cumulantes exactos en el caso límite:

$$M_{\sigma}^{at} = (I + G_{\sigma}^{ff,at} \cdot W_{\sigma}^0)^{-1} \cdot G_{\sigma}^{ff,at} \quad (2-28)$$

Para el caso localizado:

$$W_{\uparrow}^0(z) = |\Delta|^2 \varphi_{\uparrow}^0(z) \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \quad (2-29)$$

$$W_{\downarrow}^0(z) = |\Delta|^2 \varphi_{\downarrow}^0(z) \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix} \quad (2-30)$$

Donde:

$$\varphi_{\sigma}^0(z) = \frac{-1}{z - \epsilon_0 - \mu} \quad (2-31)$$

Debido a que la contribución de los electrones de conducción esta sobre estimada, porque todos los estados están concentrados en un solo nivel de energía ϵ_0 , se reemplaza V^2 por Δ^2 para moderar el efecto, con $\Delta = \pi V^2/2D$ el parámetro de Anderson. La aproximación atómica consiste en reemplazar los cumulantes desconocidos M_{σ} por el cumulante del caso limite M_{σ}^{at} , es decir:

$$M_{\sigma} \rightarrow M_{\sigma}^{ap} \quad (2-32)$$

$$\begin{aligned} M_{\uparrow}^{ap}(iw) &= \begin{pmatrix} m_{11}^{ap} & m_{13}^{ap} \\ m_{31}^{ap} & m_{33}^{ap} \end{pmatrix} \\ &= \frac{\begin{pmatrix} g_{11} & g_{13} \\ g_{31} & g_{33} \end{pmatrix} + |\Delta|^2 \varphi_{\uparrow}^0(iw)(g_{11}g_{33} - g_{13}g_{31}) \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix}}{1 + |V|^2 \varphi_{\uparrow}^0(iw)(g_{11} + g_{33} + g_{13} + g_{31})} \end{aligned} \quad (2-33)$$

$$\begin{aligned}
M_{\downarrow}^{ap}(iw) &= \begin{pmatrix} m_{22}^{ap} & m_{24}^{ap} \\ m_{42}^{ap} & m_{44}^{ap} \end{pmatrix} \\
&= \frac{\begin{pmatrix} g_{22} & g_{24} \\ g_{42} & g_{44} \end{pmatrix} + |\Delta|^2 \varphi_{\downarrow}^0(iw)(g_{22}g_{44} - g_{24}g_{42}) \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}}{1 + |V|^2 \varphi_{\downarrow}^0(iw)(g_{22} + g_{44} - g_{24} - g_{42})}
\end{aligned} \tag{2-34}$$

De la ecuación 2-8:

$$\langle X_{j,00} \rangle + \langle X_{j,\sigma\sigma} \rangle + \langle X_{j,\bar{\sigma}\bar{\sigma}} \rangle + \langle X_{j,dd} \rangle = 1 \tag{2-35}$$

De cada término, podemos calcular el promedio, asociados a los procesos $(0, +)$ y $(-, d)$, se destruye un electrón con spin up:

$$\langle X_{0,0} \rangle = \langle X_1 X_1^{\dagger} \rangle = \left(\frac{-1}{\pi} \right) \int_{-\infty}^{+\infty} dw \text{Im}(G_{11}^{ff})(1 - n_F) \tag{2-36}$$

$$\langle X_{+,+} \rangle = \langle X_1^{\dagger} X_1 \rangle = \left(\frac{-1}{\pi} \right) \int_{-\infty}^{+\infty} dw \text{Im}(G_{11}^{ff})n_F \tag{2-37}$$

$$\langle X_{-,-} \rangle = \langle X_3 X_3^{\dagger} \rangle = \left(\frac{-1}{\pi} \right) \int_{-\infty}^{+\infty} dw \text{Im}(G_{33}^{ff})(1 - n_F) \tag{2-38}$$

$$\langle X_{d,d} \rangle = \langle X_3^{\dagger} X_3 \rangle = \left(\frac{-1}{\pi} \right) \int_{-\infty}^{+\infty} dw \text{Im}(G_{33}^{ff})n_F \tag{2-39}$$

Con $n_F = 1/[1 + \exp(\beta x)]$ la distribución de Fermi-Dirac.

De manera similar para los procesos $(0, -)$ y $(+, d)$, se destruye un electrón con spin down:

$$\langle X_{j,00} \rangle + \langle X_{j,\sigma\sigma} \rangle + \langle X_{j,\bar{\sigma}\bar{\sigma}} \rangle + \langle X_{j,dd} \rangle = 1 \tag{2-40}$$

$$\langle X_{0,0} \rangle = \langle X_2 X_2^{\dagger} \rangle = \left(\frac{-1}{\pi} \right) \int_{-\infty}^{+\infty} dw \text{Im}(G_{22}^{ff})(1 - n_F) \tag{2-41}$$

$$\langle X_{-,-} \rangle = \langle X_2^{\dagger} X_2 \rangle = \left(\frac{-1}{\pi} \right) \int_{-\infty}^{+\infty} dw \text{Im}(G_{22}^{ff})n_F \tag{2-42}$$

$$\langle X_{+,+} \rangle = \langle X_4 X_4^{\dagger} \rangle = \left(\frac{-1}{\pi} \right) \int_{-\infty}^{+\infty} dw \text{Im}(G_{44}^{ff})(1 - n_F) \tag{2-43}$$

$$\langle X_{d,d} \rangle = \langle X_4^{\dagger} X_4 \rangle = \left(\frac{-1}{\pi} \right) \int_{-\infty}^{+\infty} dw \text{Im}(G_{44}^{ff})n_F \tag{2-44}$$

2.3.1. Regla de suma de Friedel

La regla de suma de Friedel relaciona los estados que están debajo del nivel de Fermi (en $T=0$) generados por la dispersión de los electrones de conducción, electrones localizados y corrimiento de fase en el potencial químico, la cual satisface los principios de conservación de carga, el espín y el momento magnético orbital, aplicada al modelo de la impureza de Anderson [8]:

$$\rho_{f\sigma}(\mu) = \frac{\sin^2(\pi n_{f\sigma})}{\Delta\pi} \quad (2-45)$$

La densidad de estados se calcula así:

$$\rho_{(f,c)\sigma}(w) = \left(\frac{-1}{\pi}\right) \lim_{\eta \rightarrow 0} \text{Im}[G^{(ff,cc)\sigma}(w + i|\eta|)] \quad (2-46)$$

La ecuación 2-45 permite calcular el nivel atómico de conducción, lo más cercano al potencial químico.

2.3.2. Conductancia de un punto cuántico acoplado a una banda de conducción

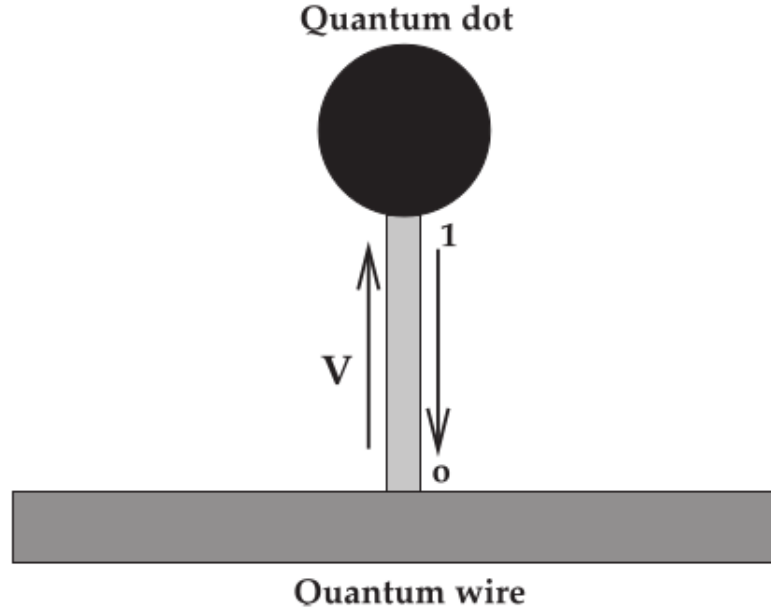


Figura 2- 2.: Punto cuántico acoplado a un canal de conducción [5].

A continuación se estudia el transporte electrónico a través de un canal de conducción que está acoplado a un punto cuántico, figura 2- 2. La conductancia está dada por la fórmula

de Landauer:

$$G = \frac{2e^2}{\hbar} \int \left(-\frac{\partial n_f}{\partial w}\right) S(w) dw \quad (2-47)$$

Donde n_F es la función de Fermi y $S(w)$ es la probabilidad de transmisión de un electrón con energía $\hbar w$. La probabilidad $S(w)$:

$$S(w) = \Gamma^2 |G_{00}^\sigma|^2 \quad (2-48)$$

Γ corresponde a la fuerza de acoplamiento entre el sitio 0 y el canal de conducción, con:

$$G_{00}^\sigma = g_{00}^\sigma + g_{00}^\sigma V G_{10}^\sigma + g_{01}^\sigma V G_{00}^\sigma \quad (2-49)$$

$$G_{10}^\sigma = g_{10}^\sigma + g_{10}^\sigma V G_{10}^\sigma + g_{11}^\sigma V G_{00}^\sigma \quad (2-50)$$

$g_{10}^\sigma = 0$ y $g_{01}^\sigma = 0$:

$$G_{00}^f = \frac{g_{00}^\sigma}{1 + g_{00}^\sigma V^2 g_{11}^\sigma} \quad (2-51)$$

Donde:

$$g_{00}^\sigma = \left(\frac{-1}{2D}\right) \ln\left(\frac{z + D + \mu}{z - D + \mu}\right); \quad g_{11}^\sigma = M_\uparrow^{at}(z) \quad (2-52)$$

2.4. Diagonalización del Hamiltoniano con hibridación local

Con hibridación local(no depende de k), 2-6 queda:

$$H = E_q \sum_\sigma C_\sigma^\dagger C_\sigma + E_f \sum_{\sigma,j} |j, \sigma\rangle \langle j, \sigma| + (E_f + U) \sum_j |j, d\rangle \langle d, j| + H_h \quad (2-53)$$

$$H_h = \sum_{jba,\sigma} V_\sigma \left(X_{j,ba}^\dagger C_\sigma + C_\sigma^\dagger X_{j,ba} \right) \quad ; \quad V(\bar{\sigma}d, k, \sigma) = \sigma V \quad (2-54)$$

Los elementos de matriz del Hamiltoniano 2-53:

$$H = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & [A] & 0 & 0 \\ 0 & 0 & [B] & 0 \\ 0 & 0 & 0 & [C] \end{pmatrix} \quad (2-55)$$

Para encontrar los autovalores de 2-55 es suficiente encontrar los autovalores de las submatrices A, B y C.

A:

$$\begin{array}{ccccc}
 & |+, 0\rangle & |0, \uparrow\rangle & |-, 0\rangle & |0, \downarrow\rangle \\
 \langle 0, +| & \epsilon_f & V & 0 & 0 \\
 \langle \uparrow, 0| & V & \epsilon_q & 0 & 0 \\
 \langle 0, -| & 0 & 0 & \epsilon_f & V \\
 \langle \downarrow, 0| & 0 & 0 & V & \epsilon_q
 \end{array} \quad (2-56)$$

B:

$$\begin{array}{ccccccc}
 & |+, \uparrow\rangle & |-, \downarrow\rangle & |+, \downarrow\rangle & |-, \uparrow\rangle & |0, \uparrow\downarrow\rangle & |d, 0\rangle \\
 \langle \uparrow, +| & \epsilon_f + \epsilon_q & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 \langle \downarrow, -| & 0 & \epsilon_f + \epsilon_q & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 \langle \downarrow, +| & 0 & 0 & \epsilon_f + \epsilon_q & 0 & V & -V \\
 \langle \uparrow, -| & 0 & 0 & 0 & \epsilon_f + \epsilon_q & V & -V \\
 \langle \uparrow\downarrow, 0| & 0 & 0 & V & V & 2\epsilon_q & 0 \\
 \langle 0, d| & 0 & 0 & -V & -V & 0 & 2\epsilon_f + U
 \end{array} \quad (2-57)$$

C:

$$\begin{array}{ccccc}
 & |d, \uparrow\rangle & |+, \uparrow\downarrow\rangle & |d, \downarrow\rangle & |-, \uparrow\downarrow\rangle & |d, \uparrow\downarrow\rangle \\
 \langle \uparrow, d| & 2\epsilon_f + \epsilon_q + U & V & 0 & 0 & 0 \\
 \langle \uparrow\downarrow, +| & V & \epsilon_f + 2\epsilon_q & 0 & 0 & 0 \\
 \langle \downarrow, d| & 0 & 0 & 2\epsilon_f + \epsilon_q + U & V & 0 \\
 \langle \uparrow\downarrow, -| & 0 & 0 & V & \epsilon_f + 2\epsilon_q & 0 \\
 \langle \uparrow\downarrow, d| & 0 & 0 & 0 & 0 & 2\epsilon_f + 2\epsilon_q + U
 \end{array} \quad (2-58)$$

Por ejemplo los elementos de matriz, el signo menos aparece por la relación dada en 2-54:

$$\begin{aligned}
 \langle \downarrow, +|H|d, 0\rangle &= \langle \downarrow, +|V_{j,+d,-}C_-^\dagger X_{j,+d}|d, 0\rangle = \langle \downarrow, +|(-V)C_-^\dagger|j, +\rangle\langle j, d|d, 0\rangle \\
 &= -V\langle \downarrow, +|C_-^\dagger|j, +, 0\rangle = -V\langle \downarrow, +|+, \downarrow\rangle = -V
 \end{aligned} \quad (2-59)$$

$$\begin{aligned}
 \langle 0, d|H|-, \uparrow\rangle &= \langle 0, d|V_{j,-d,+}X_{j,-d}^\dagger C_+|-, \uparrow\rangle = \langle 0, d|(-V)|j, d\rangle\langle j, -|-, 0\rangle \\
 &= -V\langle 0, d|d, 0\rangle = -V
 \end{aligned} \quad (2-60)$$

De manera análoga se calculan los demás elementos. Para diagonalizar 2-53 y obtener los autovalores E_i , calculamos el determinante $\det(H - E_i I) = E_i \cdot \det(A - E_i I) \cdot \det(B - E_i I) \cdot$

$\det(C - E_i I) = 0$. De aquí podemos diagonalizar A, B, C de manera individual.

A:

$$\begin{aligned}
 \det(A - E_i I) &= (\epsilon_f - E_i)(\epsilon_q - E_i) - V^2 \\
 &= E_i^2 - E_i(\epsilon_f + \epsilon_q) + \epsilon_f \epsilon_q - V^2 = 0 \\
 \Rightarrow E_i &= \frac{(\epsilon_f + \epsilon_q) \pm \sqrt{(\epsilon_f + \epsilon_q)^2 + 4(V^2 - \epsilon_f \epsilon_q)}}{2} \\
 E_i &= \frac{1}{2}(\epsilon_f + \epsilon_q \pm \Delta) ; \quad \Delta = \sqrt{(\epsilon_f - \epsilon_q)^2 + 4V^2}
 \end{aligned} \tag{2-61}$$

Para encontrar los autovectores se usa $A\vec{V} - E_i\vec{V} = 0$, $\vec{V} = (a^\pm, b^\pm)$:

$$A\vec{V} - E_i\vec{V} = \begin{pmatrix} \frac{\epsilon_f - \epsilon_q \mp \Delta}{2} & V \\ V & \frac{\epsilon_q - \epsilon_f \mp \Delta}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a^\pm \\ b^\pm \end{pmatrix} = 0 \tag{2-62}$$

$$\frac{\epsilon_f - \epsilon_q \mp \Delta}{2} a^\pm + V b^\pm = 0$$

Se define :

$$\begin{aligned}
 \tan(\phi^+) &= \frac{a^+}{b^+} = \frac{2V}{\Delta - \epsilon_f + \epsilon_q} \\
 \Rightarrow \vec{V}^+ &= \sin(\phi)|+, 0\rangle + \cos(\phi)|0, \uparrow\rangle ; \quad \phi = \phi^+
 \end{aligned} \tag{2-63}$$

Se define :

$$\begin{aligned}
 \tan(\phi^-) &= \frac{b^-}{a^-} = \frac{-\Delta - \epsilon_f + \epsilon_q}{2V} \quad \text{Es facil demostrar} \quad \frac{\cot(\phi^+)}{\cot(\phi^-)} = -1 \\
 \Rightarrow \vec{V}^- &= \cos(\phi)|+, 0\rangle - \sin(\phi)|0, \uparrow\rangle
 \end{aligned} \tag{2-64}$$

B:

En la matriz B se identifican dos matrices, una 2x2 (estados $|+, \uparrow\rangle, |-, \downarrow\rangle$) y otra 4x4 (estados $|+, \downarrow\rangle, |-, \uparrow\rangle, |0, \uparrow\downarrow\rangle, |d, 0\rangle$) la definimos como D.

La matriz 2x2 sus autovalores y autoestados:

$$\begin{aligned}
 E_i &= \epsilon_f + \epsilon_q \\
 \Rightarrow \vec{V}_1 &= |+, \uparrow\rangle ; \quad \vec{V}_2 = |-, \downarrow\rangle
 \end{aligned} \tag{2-65}$$

La matriz $D - E_i I$:

$$D - E_i I = \begin{pmatrix} \epsilon_f + \epsilon_q - E_i & 0 & V & -V \\ 0 & \epsilon_f + \epsilon_q - E_i & V & -V \\ V & V & 2\epsilon_q - E_i & 0 \\ -V & -V & 0 & 2\epsilon_f + U - E_i \end{pmatrix} \quad (2-66)$$

Por propiedades de los determinantes si a una fila de una matriz le sumo otra fila de esta su determinante no se ve alterado, restando las dos primeras filas de 2-66 y colocando este resultado en la primera fila:

$$\begin{pmatrix} \epsilon_f + \epsilon_q - E_i & -(\epsilon_f + \epsilon_q - E_i) & 0 & 0 \\ 0 & \epsilon_f + \epsilon_q - E_i & V & -V \\ V & V & 2\epsilon_q - E_i & 0 \\ -V & -V & 0 & 2\epsilon_f + U - E_i \end{pmatrix} \quad (2-67)$$

Restando las dos primeras columnas de 2-67 y colocando este resultado en la primera columna:

$$\begin{pmatrix} 2(\epsilon_f + \epsilon_q - E_i) & -(\epsilon_f + \epsilon_q - E_i) & 0 & 0 \\ -(\epsilon_f + \epsilon_q - E_i) & \epsilon_f + \epsilon_q - E_i & V & -V \\ 0 & V & 2\epsilon_q - E_i & 0 \\ 0 & -V & 0 & 2\epsilon_f + U - E_i \end{pmatrix} \quad (2-68)$$

Calculando el determinante de 2-68:

$$\begin{aligned} & 2(\epsilon_f + \epsilon_q - E_i) \det(E) - [-(\epsilon_f + \epsilon_q - E_i)]^2 (2\epsilon_q - E_i)(2\epsilon_f + U - E_i) \\ &= (\epsilon_f + \epsilon_q - E_i) [2\det(E) - (\epsilon_f + \epsilon_q - E_i)(2\epsilon_q - E_i)(2\epsilon_f + U - E_i)] \\ &= 0 \end{aligned} \quad (2-69)$$

Con \mathbf{E} :

$$E = \begin{pmatrix} \epsilon_f + \epsilon_q - E_i & V & -V \\ V & 2\epsilon_q - E_i & 0 \\ -V & 0 & 2\epsilon_f + U - E_i \end{pmatrix} \quad (2-70)$$

De 2-69, el primer termino:

$$\Rightarrow (\epsilon_f + \epsilon_q - E_1 = 0) \Rightarrow E_1 = \epsilon_f + \epsilon_q \Rightarrow \vec{V}_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+, \downarrow\rangle + |-, \uparrow\rangle) \quad (2-71)$$

De 2-69, el segundo termino:

$$2\det(E) - (\epsilon_f + \epsilon_q - E_i)(2\epsilon_q - E_i)(2\epsilon_f + U - E_i) = 0 \quad (2-72)$$

El determinante de E (ver 2-70):

$$\begin{aligned} \det(E) &= (2\epsilon_f + U - E_i)[(2\epsilon_q - E_i)(\epsilon_f + \epsilon_q - E_i) - V^2] + (-V)(-(-V(2\epsilon_q - E_i))) \\ &= (2\epsilon_f + U - E_i)[(2\epsilon_q - E_i)(\epsilon_f + \epsilon_q - E_i) - V^2] - V^2(2\epsilon_q - E_i) \end{aligned} \quad (2-73)$$

Reemplazando 2-73 en 2-72:

$$\det(D - E_i I) = (2\epsilon_f + U - E_i)(\epsilon_f + \epsilon_q - E_i)(2\epsilon_q - E_i) - 2V^2[2(\epsilon_f + \epsilon_q) + U - 2E_i] \quad (2-74)$$

Notar que 2-74 es una ecuación cubica. Expandiendo 2-74 y agrupando términos:

$$\begin{aligned} E_i^3 + k_2 E_i^2 + k_1 E_i + k_0 &= 0 \\ k_0 &= 2UV^2 - 2U\epsilon_f\epsilon_q - 2U\epsilon_q^2 + 4V^2\epsilon_f + 4V^2\epsilon_q - 4\epsilon_f^2\epsilon_q - 4\epsilon_f\epsilon_q^2 \\ k_1 &= \epsilon_f U + 3\epsilon_q U - 4V^2 + 2(\epsilon_f + \epsilon_q)^2 + 4\epsilon_f\epsilon_q \\ k_2 &= -(3\epsilon_f + 3\epsilon_q + U) \end{aligned} \quad (2-75)$$

La ecuación 2-75 se soluciona utilizando la formula de cardano:

$$\begin{aligned} E_i &= z_n - \frac{k_2}{3} ; \quad z_n = 2\sqrt{\frac{-p}{3}} \cos\left(\frac{\theta + 2n\pi}{3}\right) ; \quad n = 0, 1, 2 ; \quad p = k_1 - \frac{k_2^2}{3} \\ \cos(\theta) &= -\frac{q}{2}\sqrt{\frac{27}{-p^3}} = R\sqrt{\frac{1}{-Q^3}} ; \quad Q = \frac{p}{3} ; \quad q = \frac{2k_2^3}{27} - \frac{2k_1 k_2}{3} + k_0 ; \quad R = -\frac{q}{2} \end{aligned} \quad (2-76)$$

Calculando los autovalores de 2-66:

$$D\vec{V} - E_i\vec{V} = \begin{pmatrix} \epsilon_f + \epsilon_q - E_i & 0 & V & -V \\ 0 & \epsilon_f + \epsilon_q - E_i & V & -V \\ V & V & 2\epsilon_q - E_i & 0 \\ -V & -V & 0 & 2\epsilon_f + U - E_i \end{pmatrix} \begin{pmatrix} d1 \\ d2 \\ d3 \\ d4 \end{pmatrix} = 0 \quad (2-77)$$

De aqui salen 4 ecuaciones:

$$\begin{aligned} (\epsilon_f + \epsilon_q - E_i)d_1 + d_3V - d_4V &= 0 \\ (\epsilon_f + \epsilon_q - E_i)d_2 + d_3V - d_4V &= 0 \\ Vd_1 + Vd_2 + (2\epsilon_q - E_i)d_3 &= 0 \\ -Vd_1 - Vd_2 + (2\epsilon_f + U - E_i)d_4 &= 0 \end{aligned} \quad (2-78)$$

Restando la primera ecuación y la segunda ecuación se obtiene $d_1 = d_2$ y de la tercera y cuarta ecuación:

$$\begin{aligned} d_3 &= \frac{-2V}{2\epsilon_q - E_i} d_1 \\ d_4 &= \frac{2V}{2\epsilon_f + U - E_i} d_1 \end{aligned} \quad (2-79)$$

$$\begin{pmatrix} d1 \\ d2 \\ d3 \\ d4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ \frac{-2V}{2\epsilon_q - E_i} \\ \frac{2V}{2\epsilon_f + U - E_i} \end{pmatrix} d_1 \quad (2-80)$$

Normalizando 2-80:

$$a_i = d_1 = \frac{1}{\sqrt{2 + 4V^2 \left(\frac{1}{(2\epsilon_q - E_i)^2} \right) + \frac{1}{(2\epsilon_f + U - E_i)^2}}} \quad (2-81)$$

Por lo tanto los autoestados son:

$$|i\rangle = a_i[|+, \downarrow\rangle + |-, \uparrow\rangle] - b_i|d, 0\rangle + c_i|0, \uparrow\downarrow\rangle \quad (2-82)$$

$$b_i = \frac{2V}{E_i - 2\epsilon_f - U} a_i$$

$$c_i = \frac{2V}{E_i - 2\epsilon_q} a_i$$

C:

En la matriz C se identifican dos matrices 2x2, elementos $|d, \uparrow\rangle$, $|+, \uparrow\downarrow\rangle$ y $|d, \downarrow\rangle$, $|-, \uparrow\downarrow\rangle$, ambas matrices tienen los mismos autovalores dados por el determinante:

$$\begin{aligned} & (2\epsilon_f + \epsilon_q + U - E_i)(\epsilon_f + 2\epsilon_q - E_i) - V^2 \\ &= (2\epsilon_f + \epsilon_q + U)(\epsilon_f + 2\epsilon_q) - E_i(\epsilon_f + 2\epsilon_q) - E_i(2\epsilon_f + \epsilon_q + U) + E_i^2 - V^2 \\ &= (2\epsilon_f + \epsilon_q + U)(\epsilon_f + 2\epsilon_q) - V^2 - E_i(3\epsilon_f + 3\epsilon_q + U) + E_i^2 = 0 \end{aligned} \quad (2-83)$$

Aplicando la ecuación cuadrática:

$$E_i = \frac{(3\epsilon_f + 3\epsilon_q + U) \pm \sqrt{(3\epsilon_f + 3\epsilon_q + U)^2 - 4[(2\epsilon_f + \epsilon_q + U)(\epsilon_f + 2\epsilon_q) - V^2]}}{2} \quad (2-84)$$

El termino dentro de la raíz de 2-84 se puede reescribir:

$$\begin{aligned} & [(2\epsilon_f + \epsilon_q + U) + (\epsilon_f + 2\epsilon_q)]^2 - 4(2\epsilon_f + \epsilon_q + U)(\epsilon_f + 2\epsilon_q) + 4V^2 \\ &= (2\epsilon_f + \epsilon_q + U)^2 + (\epsilon_f + 2\epsilon_q)^2 + 2(2\epsilon_f + \epsilon_q + U)(\epsilon_f + 2\epsilon_q) \\ &\quad - 4(2\epsilon_f + \epsilon_q + U)(\epsilon_f + 2\epsilon_q) + 4V^2 \\ &= (2\epsilon_f + \epsilon_q + U)^2 + (\epsilon_f + 2\epsilon_q)^2 - 2(2\epsilon_f + \epsilon_q + U)(\epsilon_f + 2\epsilon_q) + 4V^2 \\ &= [(2\epsilon_f + \epsilon_q + U) - (\epsilon_f + 2\epsilon_q)]^2 + 4V^2 \\ &= (\epsilon_f - \epsilon_q + U)^2 + 4V^2 \end{aligned} \quad (2-85)$$

Definiendo:

$$\Delta' = \sqrt{(\epsilon_f - \epsilon_q + U)^2 + 4V^2} \quad (2-86)$$

2-84 queda:

$$E_i = \frac{3\epsilon_f + \epsilon_q + U \pm \Delta'}{2} \quad (2-87)$$

Los autovalores:

$$\begin{pmatrix} 2\epsilon_f + \epsilon_q + U - E_i & V \\ V & \epsilon_f + 2\epsilon_q - E_i \end{pmatrix} \begin{pmatrix} d1 \\ d2 \end{pmatrix} = 0 \quad (2-88)$$

Los terminos de la diagonal:

$$\begin{aligned} 2\epsilon_f + \epsilon_q + U - E_i &= 2\epsilon_f + \epsilon_q + U - \frac{1}{2}(3\epsilon_f + 3\epsilon_q + U \pm \Delta') \\ &= \frac{1}{2}(4\epsilon_f + 2\epsilon_q + 2U - 3\epsilon_f - 3\epsilon_q - U \mp \Delta') \\ &= \frac{1}{2}(\epsilon_f - \epsilon_q + U \mp \Delta') \end{aligned} \quad (2-89)$$

Y:

$$\begin{aligned} 2\epsilon_f + 2\epsilon_q - E_i &= \epsilon_f + 2\epsilon_q - \frac{1}{2}(3\epsilon_f + 3\epsilon_q + U \pm \Delta') \\ &= \frac{1}{2}(2\epsilon_f + 4\epsilon_q - 3\epsilon_f - 3\epsilon_q - U \mp \Delta') \\ &= \frac{1}{2}(-\epsilon_f + \epsilon_q - U \mp \Delta') \end{aligned} \quad (2-90)$$

Por lo tanto 2-88:

$$\begin{pmatrix} \frac{1}{2}(\epsilon_f - \epsilon_q + U \mp \Delta') & V \\ V & \frac{1}{2}(-\epsilon_f + \epsilon_q - U \mp \Delta') \end{pmatrix} \begin{pmatrix} d1 \\ d2 \end{pmatrix} = 0 \quad (2-91)$$

En sistemas de ecuaciones:

$$\frac{1}{2}(\epsilon_f - \epsilon_q + U \mp \Delta')d_1 + Vd_2 = 0 \quad (2-92)$$

$$Vd_1 + \frac{1}{2}(-\epsilon_f + \epsilon_q - U \mp \Delta')d_2 = 0$$

Definiendo:

$$\tan(\theta) = \frac{2V}{\epsilon_f + U - \epsilon_q - \Delta'} \quad (2-93)$$

Se obtienen los autovectores para (+):

$$\sin(\theta)|d, \uparrow\rangle + \cos(\theta)|+, \uparrow\downarrow\rangle \quad (2-94)$$

$$\sin(\theta)|d, \downarrow\rangle + \cos(\theta)|-, \uparrow\downarrow\rangle \quad (2-95)$$

Y para (-):

$$-\cos(\theta)|d, \uparrow\rangle + \sin(\theta)|+, \uparrow\downarrow\rangle \quad (2-96)$$

$$-\cos(\theta)|d, \downarrow\rangle + \sin(\theta)|-, \uparrow\downarrow\rangle \quad (2-97)$$

Los resultados de autovalores y autovectores se resumen en la tabla **A-2** del Apéndice A.

3. Resultados

A continuación se muestran los resultados de la aproximación atómica del modelo de Anderson para una impureza, con $\Delta = \pi V^2/2D = 0.01$, $D=1.0$, $\mu = 0$ y $\eta = 10^{-6}$ para el calculo del limite. En las gráficas **3- 1** - **3- 9** se observa la evolución de la densidad de estados en función de la repulsión de Coulomb U . En la gráficas **3- 4,3- 5** y **3- 6** se observa como aparece la estructura de los tres picos característica del modelo de la impureza, sin embargo el pico de Kondo aun no se forma. En la gráfica **3- 7** se observa el pico de Kondo. En la gráfica **3- 8** se observa el caso simétrico del modelo de Anderson, en el que el número total de ocupación es $n_f = 1.0$. A medida que aumenta U , el pico de Kondo continua ligado alrededor del potencial químico (gráfica **3- 9**). En la gráfica **3- 10** se tiene la densidad de estados del estado localizado f en el potencial químico μ , se observa que para $(U < 15.0\Delta)$ la densidad de estados en μ decae conforme disminuye U , mientras que para $U > 15.0\Delta$ la densidad de estados permanece casi constante, $n_f \simeq 1$ y de la regla de suma de Friedel 2-45 $\rho_f(\mu) = 1/\pi\Delta$. En la sub-gráfica se tiene la densidad de estados de los electrones de conducción en el potencial quimico, mostrando como disminuyen los estados de conducción, lo que indica que pasan a la banda del estado localizado, apantallando la impureza y generando el efecto Kondo.

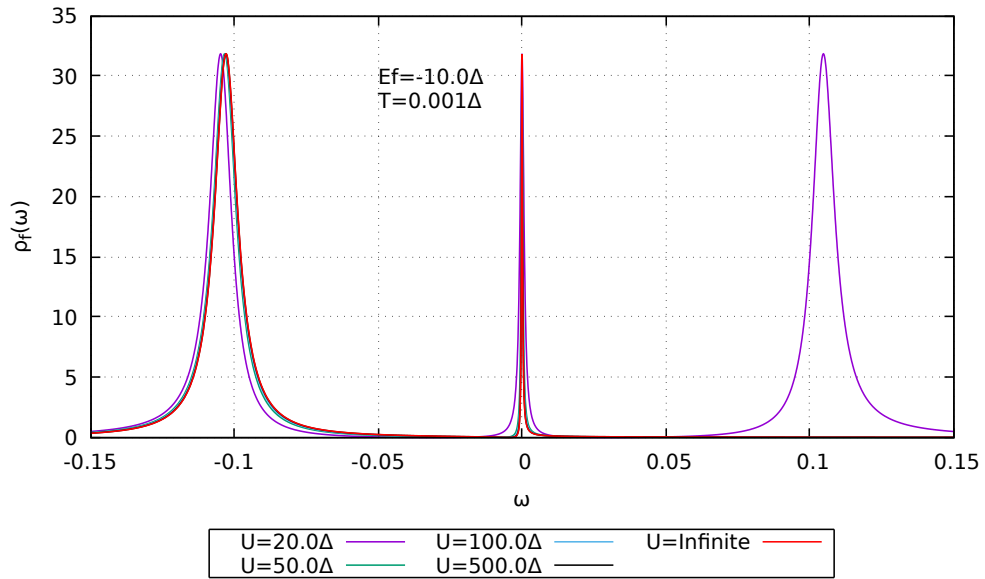


Figura **3- 1**.: Densidad de estados para $E_f = -10.0\Delta$, $T = 0.001\Delta$ en función de $U = 20.0\Delta$, 50.0Δ , 100.0Δ , 500.0Δ y ∞ .

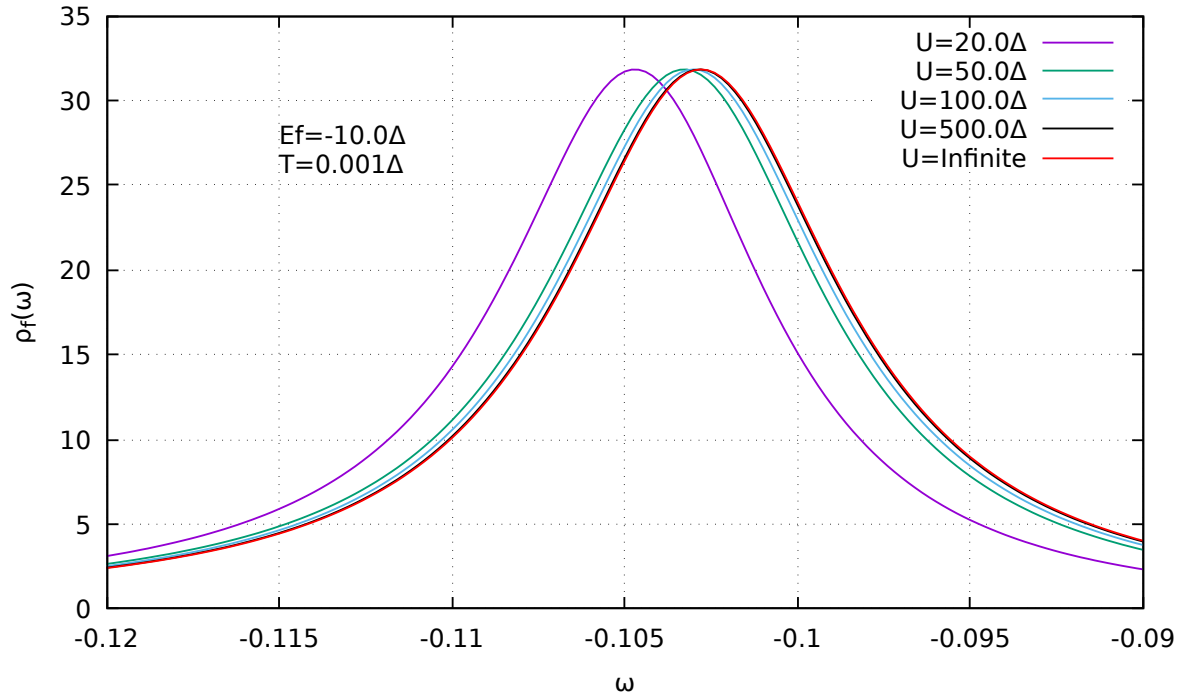


Figura 3- 2.: Detalle de la banda mas baja de la gráfica 3- 1.

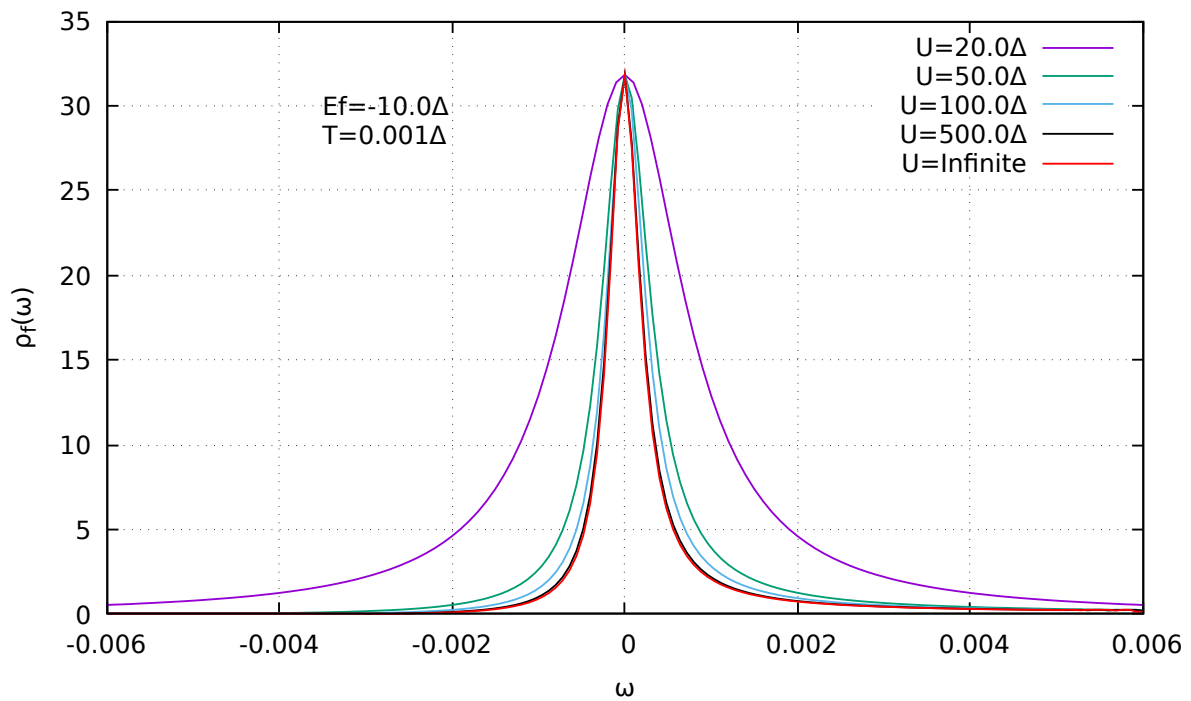


Figura 3- 3.: Detalle del pico de Kondo figura 3- 1.

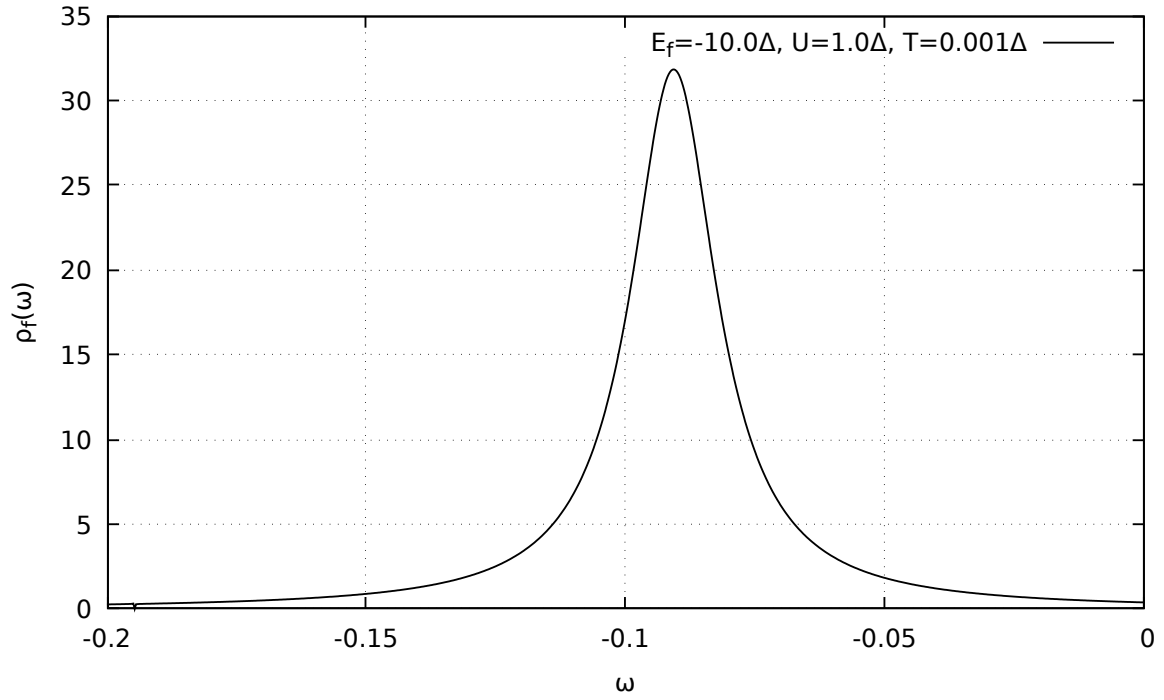


Figura 3- 4.: Densidad de estados $\rho_f(w)$ para $U=1.0\Delta$ y $E_f = -10.0\Delta$ y $T=0.001\Delta$.

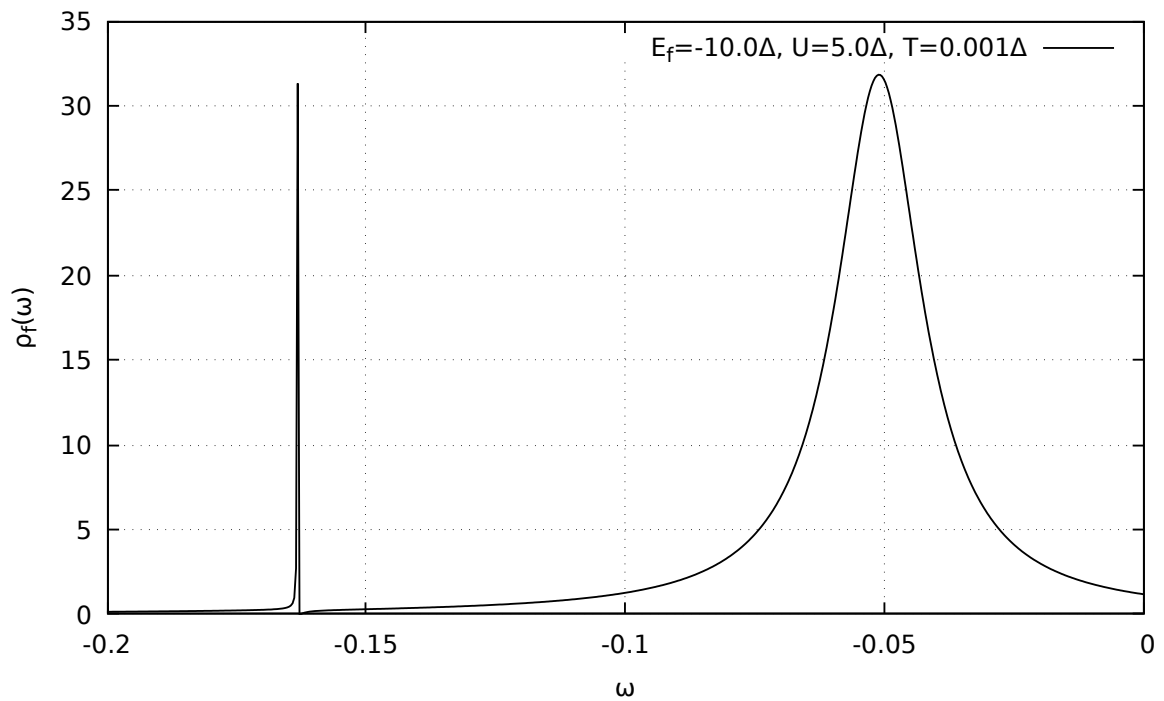


Figura 3- 5.: Densidad de estados $\rho_f(w)$ para $U=5.0\Delta$ y $E_f = -10.0\Delta$ y $T=0.001\Delta$.

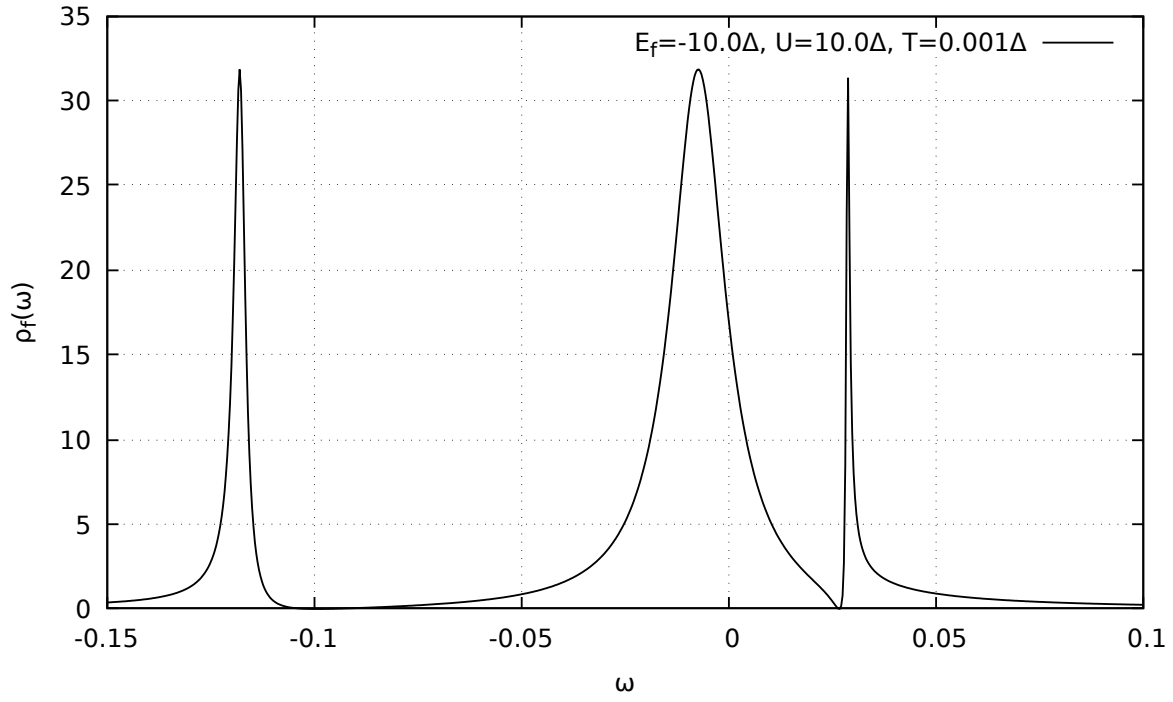


Figura 3- 6.: Densidad de estados $\rho_f(w)$ para $U=10.0\Delta$ y $E_f = -10.0\Delta$ y $T=0.001\Delta$..

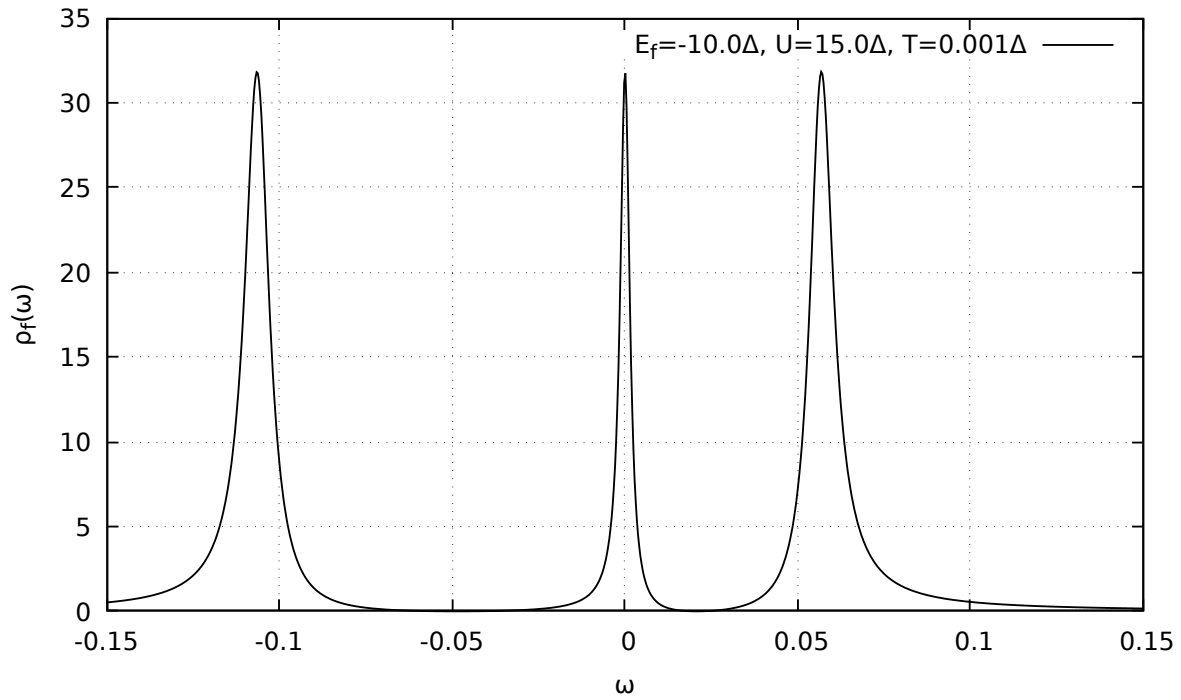


Figura 3- 7.: Densidad de estados $\rho_f(w)$ para $U=15.0\Delta$ y $E_f = -10.0\Delta$ y $T=0.001\Delta$..

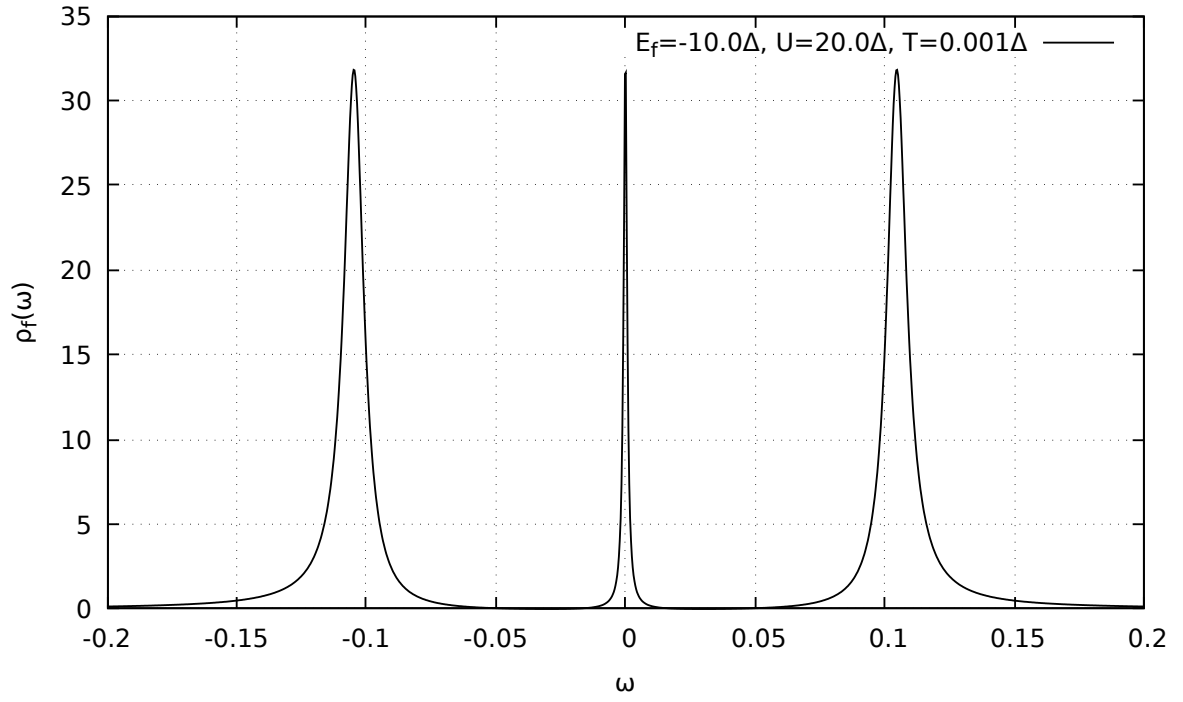


Figura 3- 8.: Densidad de estados $\rho_f(w)$ para $U=20.0\Delta$ y $E_f = -10.0\Delta$ y $T=0.001\Delta$. Limite simétrico del modelo de Anderson.

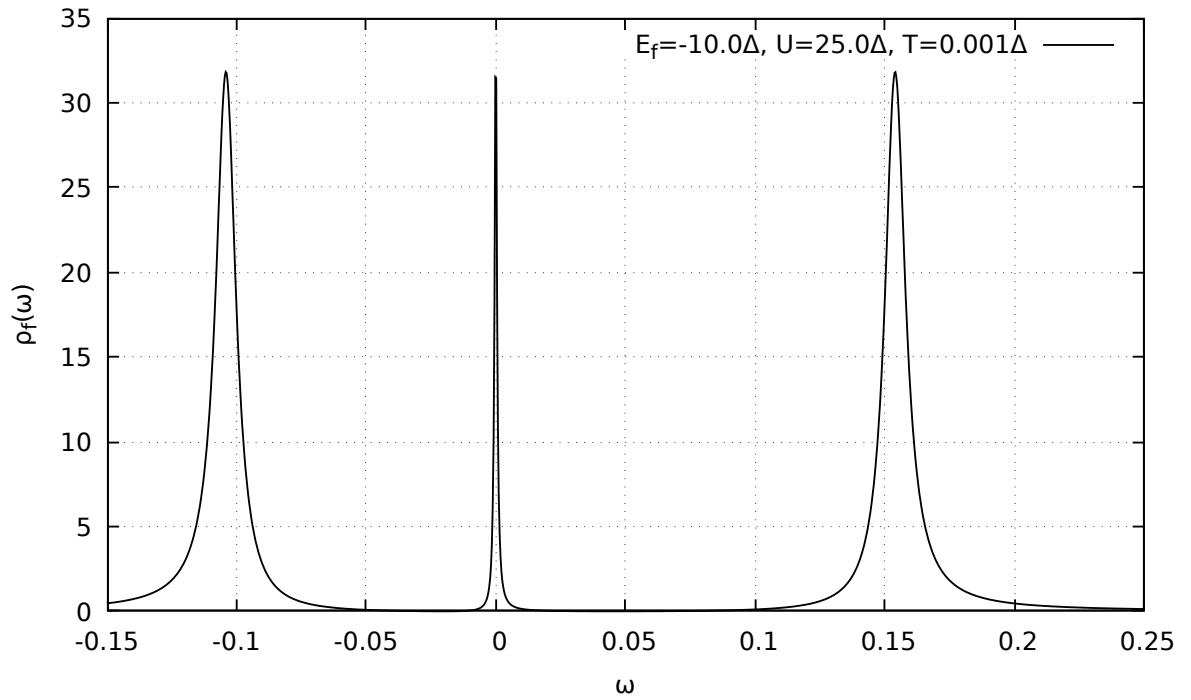


Figura 3- 9.: Densidad de estados $\rho_f(w)$ para $U=25.0\Delta$ y $E_f = -10.0\Delta$ y $T=0.001\Delta$.

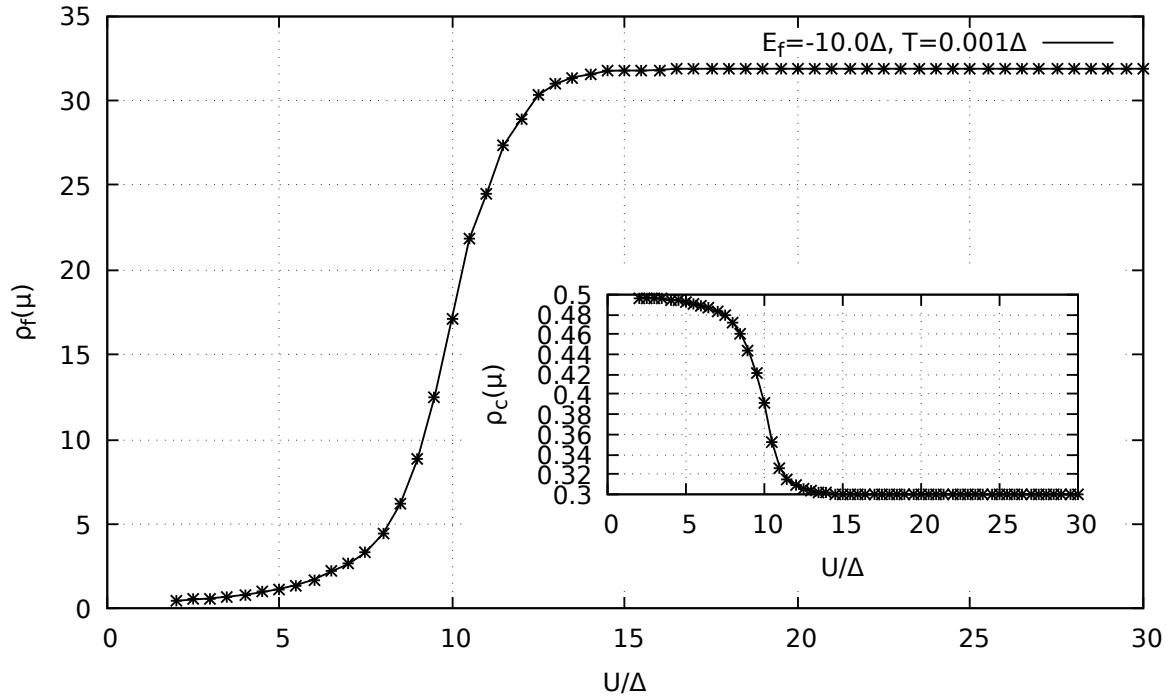


Figura 3- 10.: Densidad de estados en el potencial químico $\rho_f(\mu)$ en función de la energía de correlación U . En el cuadro interior se tiene la densidad de estados de los electrones de conducción en el potencial químico $\rho_c(\mu)$, en función de U .

En la gráfica 3- 11 se tiene el número de ocupación total del estado localizado n_f como función de la energía de repulsión U , se observa que para $U < 15.0\Delta$ n_f varía entre 1 y 2, mientras que para $U > 15.0\Delta$ a medida que aumenta U , $n_f \simeq 1.0$. En las gráficas 3- 12 - 3- 17 se fija la energía de repulsión $U = 20.0\Delta$ y se varía la energía del estado localizado E_f para observar todos los regímenes del modelo: $E_f = 5.0\Delta$ (empty dot), $E_f = 0.0\Delta$ (intermediate valence (IV)), $E_f = -5.0\Delta$ y $E_f = -15.0\Delta$ (régimen de Kondo), $E_f = -20.0\Delta$ (paso del régimen de Kondo al régimen magnético) y $E_f = -25.0\Delta$ (régimen magnético). Se observan dos picos en la gráfica 3- 12, $n_f \simeq 0.12$. En 3- 13 se da un caso particular de valencia intermedia donde la densidad de estados presenta tres picos que son típicos del régimen de Kondo, sin formar el pico de Kondo, $n_f \simeq 0.5$. En 3- 14 se observa el inicio del régimen de Kondo $E_f = -5.0\Delta$ y $n_f \simeq 0.96$ hasta $E_f \simeq -0.15\Delta$ y $n_f \simeq 1.04$, ver gráfica 3- 15, aquí el pico de Kondo está bien definido alrededor del potencial químico. La gráfica 3- 18 ilustra todos los regímenes del modelo. Para $E_f < -15.0\Delta$ se aprecia que el estado doblemente ocupado en la banda de conducción altera el efecto Kondo, incrementando el ancho del pico de Kondo, gráfica 3- 16 $E_f \simeq U$ y $n_f \simeq 1.5$, en este caso desaparece el efecto Kondo y se llama régimen magnético, debido a que E_f se hace cada vez más negativo y da lugar a una competencia entre el estado Kondo $|11\rangle$ y los dos estados magnéticos $|14\rangle, |15\rangle$ (ver A-2). En 3- 17 se tiene ($E_f + U \ll 0$) y aquí el estado de doble ocupación está casi lleno, $n_f \simeq 1.88$.

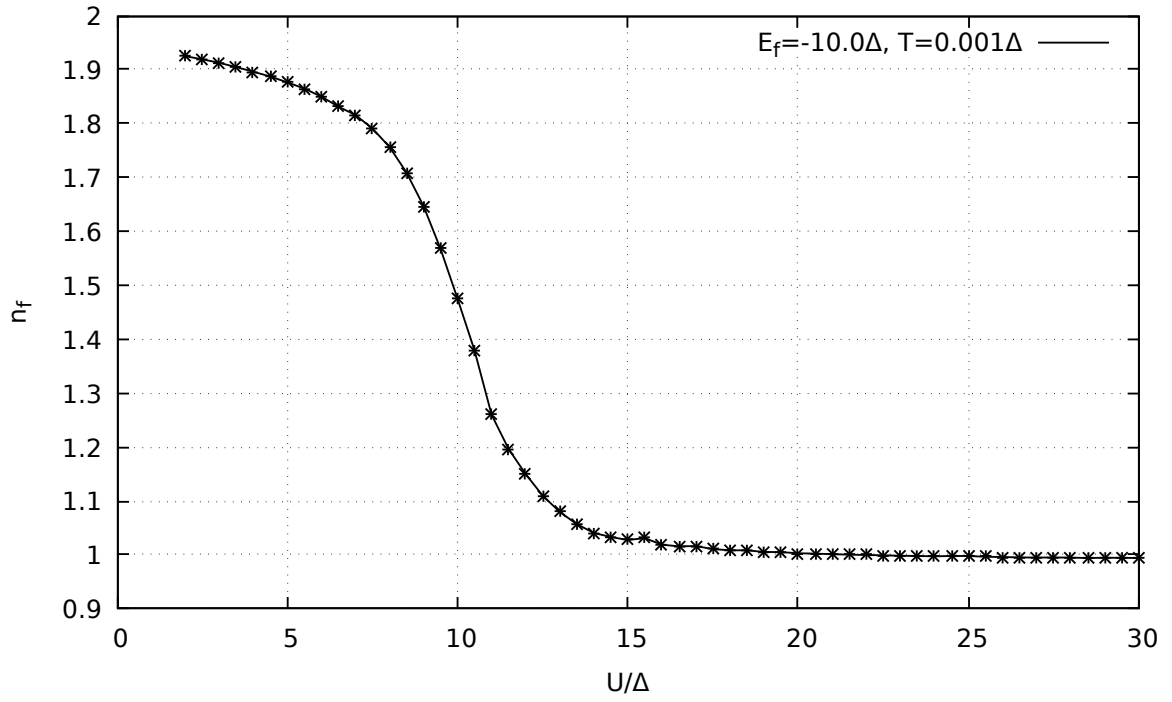


Figura 3- 11.: Número de ocupación total η_f en función de U , para $E_f = -10.0\Delta$ y $T = 0.001\Delta$.

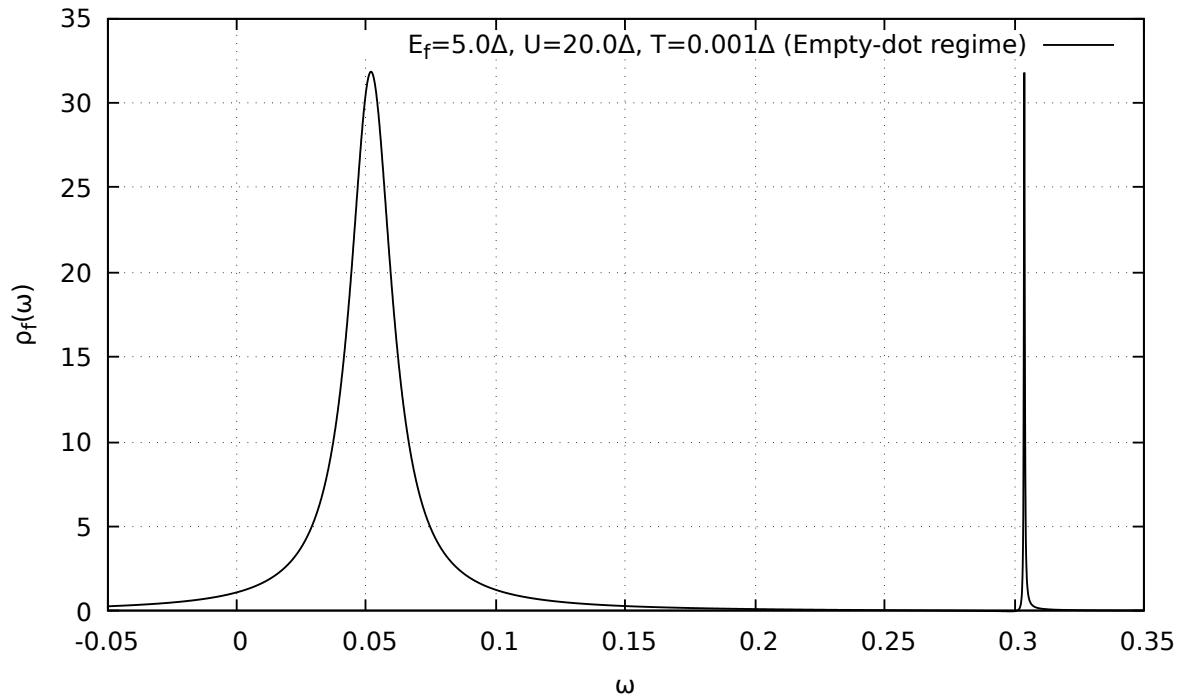


Figura 3- 12.: Densidad de estados $\rho_f(w)$ para $U=20.0\Delta$ y $E_f = 5.0\Delta$ y $T=0.001\Delta$.

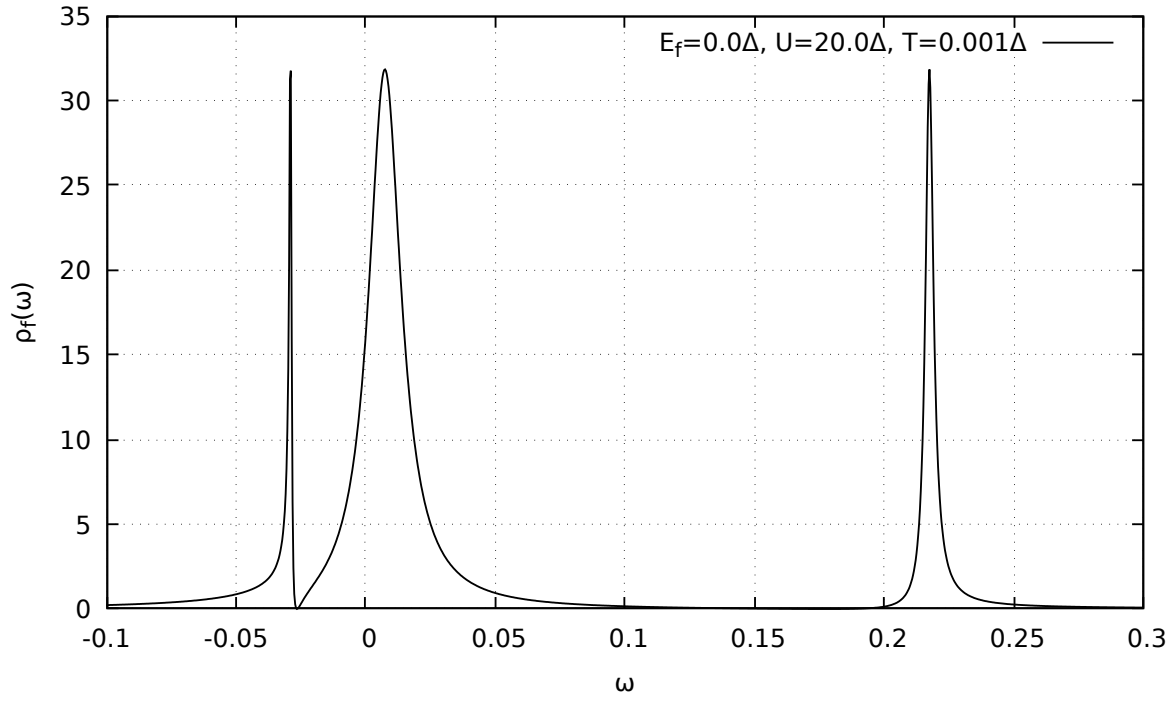


Figura 3- 13.: Densidad de estados $\rho_f(w)$ para $U=20.0\Delta$ y $E_f = 0.0\Delta$ y $T=0.001\Delta$.

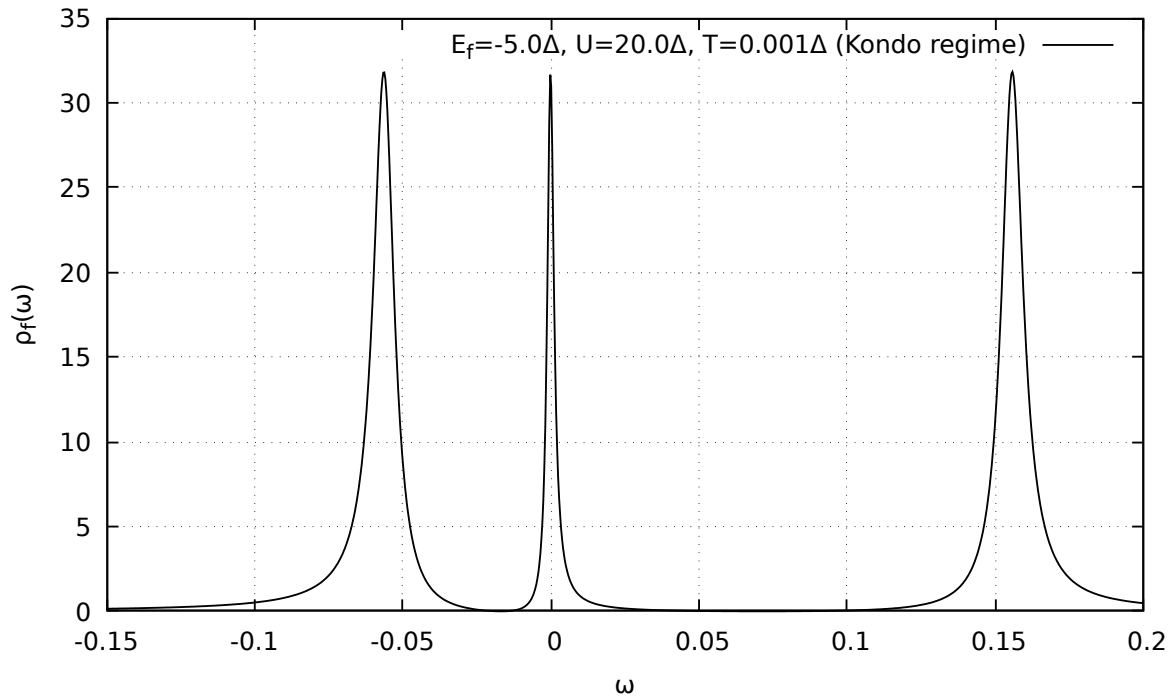


Figura 3- 14.: Densidad de estados $\rho_f(w)$ para $U=20.0\Delta$ y $E_f = -5.0\Delta$ y $T=0.001\Delta$.

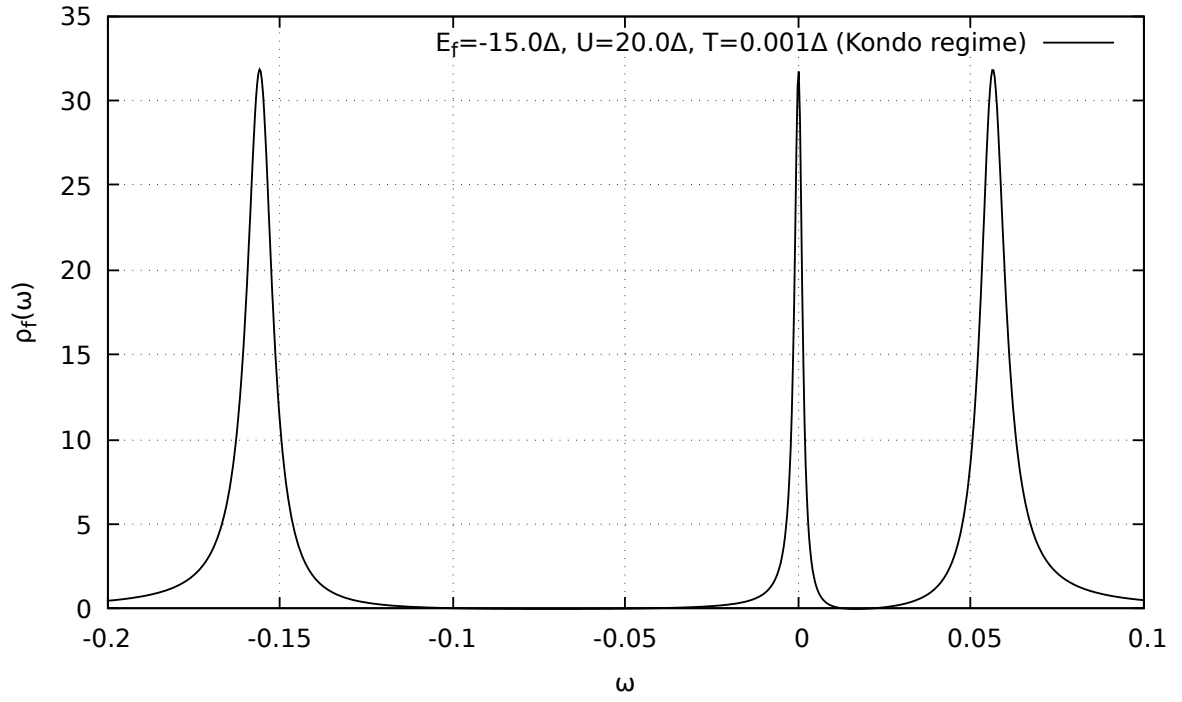


Figura 3- 15.: Densidad de estados $\rho_f(w)$ para $U=20.0\Delta$ y $E_f = -15.0\Delta$ y $T=0.001\Delta$.

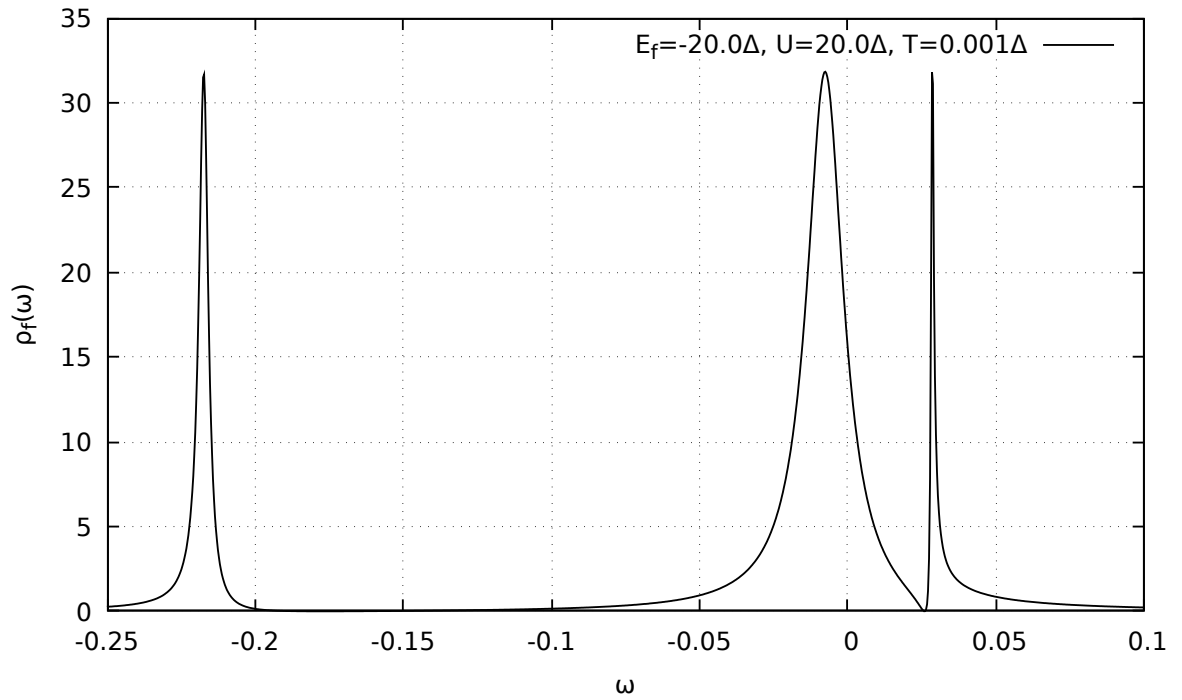


Figura 3- 16.: Densidad de estados $\rho_f(w)$ para $U=20.0\Delta$ y $E_f = -20.0\Delta$ y $T=0.001\Delta$.

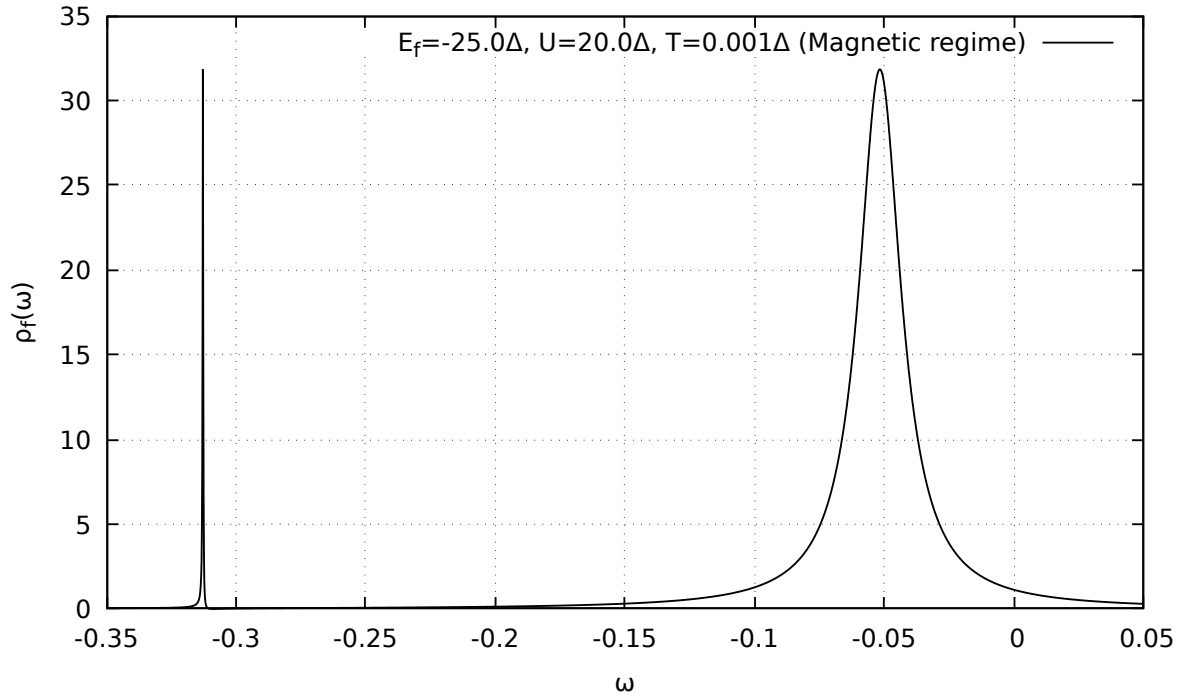


Figura 3- 17.: Densidad de estados $\rho_f(w)$ para $U=20.0\Delta$ y $E_f = -25.0\Delta$ y $T=0.001\Delta$.

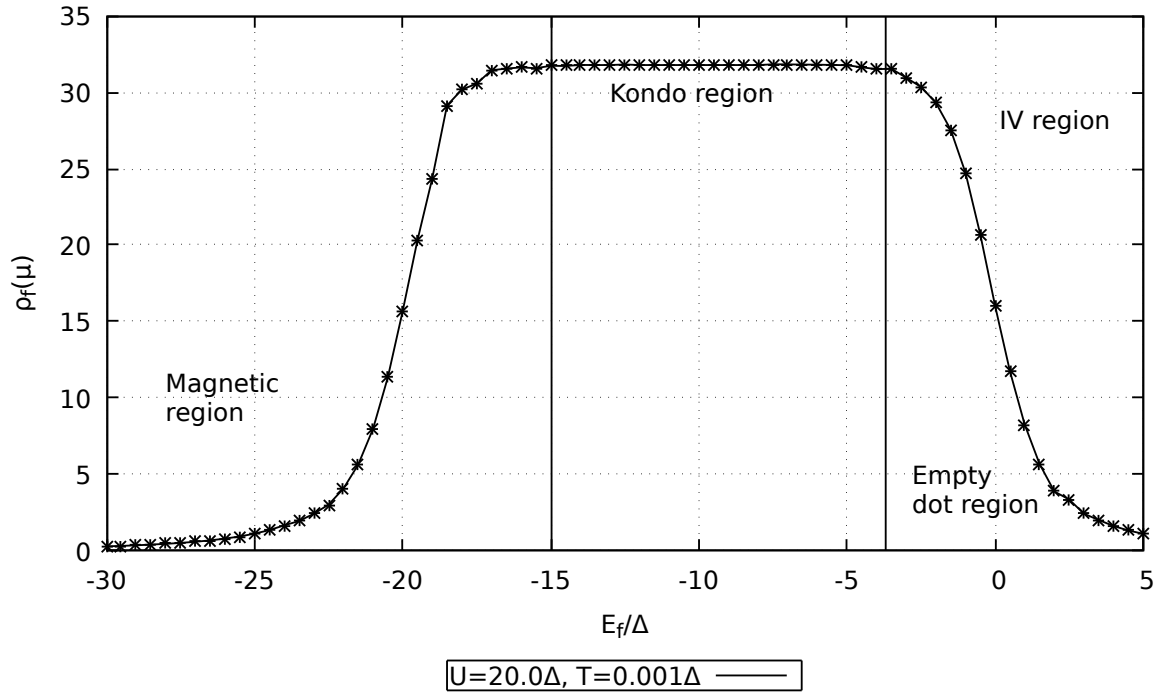


Figura 3- 18.: Densidad de estados en el potencial químico en función de E_f , para $U = 20.0\Delta$ y $T = 0.001\Delta$.

En **3- 19** se observa como surge el efecto Kondo cuando el número de ocupación total se acerca a 1, cuando $n_f = 1.0$ este caso corresponde al límite simétrico de modelo de Anderson para la impureza, gráfica **3- 8**. En la gráfica **3- 20** se calcula la conductancia en función de E_f para $U = 20.0\Delta$ y $T = 0.001\Delta$ donde se observan 4 regiones. Primero la región empty-dot, aquí E_f es positivo y se encuentra por encima del potencial químico, n_f tiene a 0 mientras la conductancia tiende a 1. En la región de valencia intermedia (IV region), E_f se encuentra cerca de $\mu = 0$, el número de ocupación varía como consecuencia de la fluctuación de carga, aumentan los efectos de interferencia cuántica y el pico de Kondo aparece cuando $n_f \rightarrow 1$. La siguiente región muestra el efecto del régimen de Kondo en el sistema punto cuántico y el canal de conducción, $n_f \simeq 1.0$ mientras que la conducción G/G_0 se aproxima a cero. El pico de Kondo se forma y se origina una interferencia cuántica destructiva de $\pi/2$ entre los electrones que van del punto cuántico al canal de conducción y los que van de regreso. En la región magnética el número de ocupación es mas grande que 1 y el estado doble ocupación domina este regimen. Mientras la energía E_f se hace mas negativa $n_f \rightarrow 2$ y la conductancia $G/G_0 \rightarrow 1$.

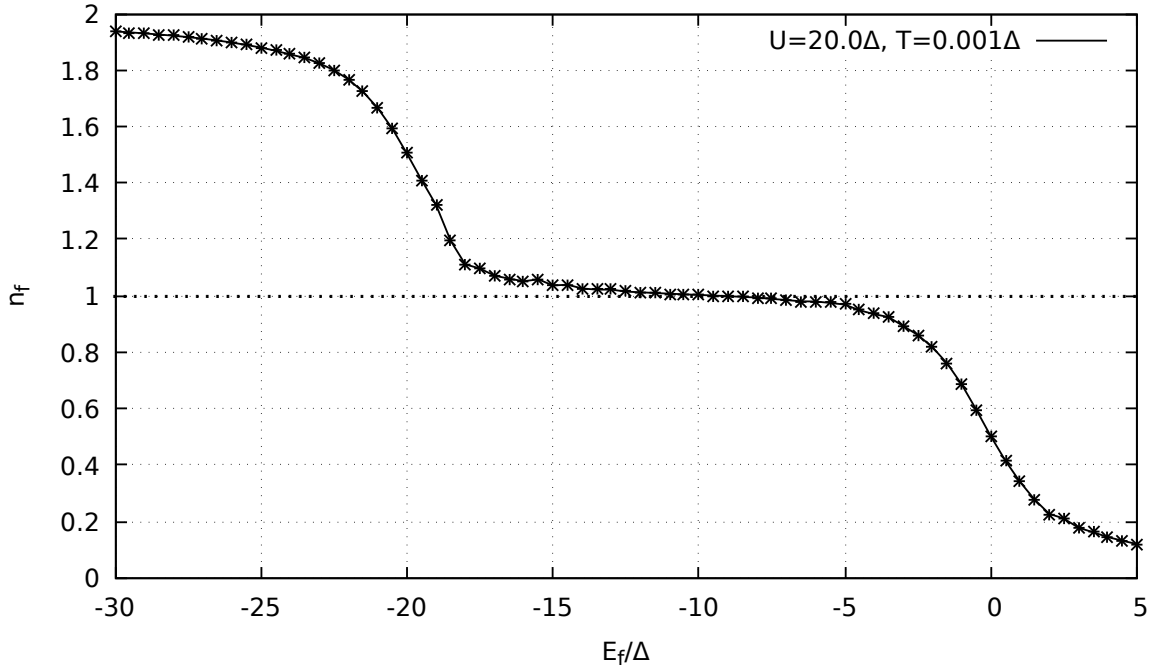


Figura **3- 19**.: Número de ocupación total n_f en función de la energía del estado localizado E_f , con $U = 20.0\Delta$ y $T = 0.001\Delta$.

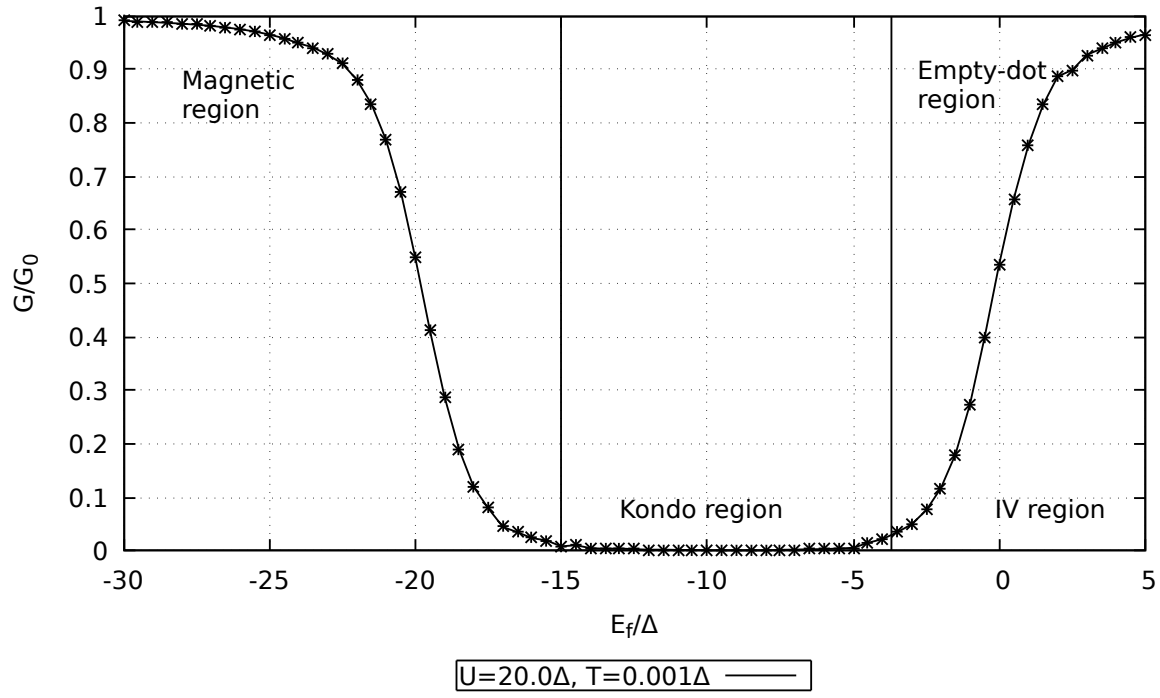


Figura 3- 20.: Conductancia del punto cuántico acoplado a la banda de conducción, para $U=20.0\Delta$ y $T=0.001\Delta$.

4. Conclusiones

Gracias a la aproximación atómica se puede caracterizar el pico de Kondo en función de la repulsión de Coulomb U y la energía del estado localizado E_f . Este método permite calcular las propiedades del modelo de la impureza de Anderson a bajas temperaturas partiendo de reducir el ancho de la banda de conducción a cero, la aproximación atómica cumple la regla de suma de Friedel válida a bajas temperaturas en los regímenes de interés, débil, intermedio y correlación fuerte. Debido al bajo costo computacional del método, las densidades de estados se calculan en unos cuantos segundos, la aproximación atómica permite describir sistemas físicos con electrones correlacionados que presenten el efecto Kondo, como puntos cuánticos.

A. Apendice

Funciones de Green en el modelo atómico para la impureza de Anderson

En este apéndice se presentan los detalles del cálculo de la función de Green para el modelo de la impureza de Anderson en el límite cuando de banda de conducción de ancho cero. En este límite todas las contribuciones del "hopping" V son eliminadas del Hamiltoniano (ver ecuación A-4). Transformando los electrones de conducción para la representación en la base de Wannier donde se tiene un sistema independiente en cada sitio. En este límite hay un átomo metálico aislado en cada sitio, uno de estos átomos representa la impureza de Anderson. En esta aproximación de un átomo aislado se conoce la solución por lo tanto se puede diagonalizar exactamente. En el Hamiltoniano de Anderson existen cuatro posibles ocupaciones para los electrones de conducción $(0, \uparrow, \downarrow, \uparrow\downarrow)$ en cualquier sitio. Respecto a la impureza también existen cuatro posibles estados $(0, +\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, d)$. Por lo tanto el espacio de Fock caracterizado por dieciséis estados $(|m, \sigma\rangle)$ como se muestra en la Tabla **A-1** y la hibridación de los estados mezclados con igual número de partículas y la misma componente de espín z . Se puede entonces diagonalizar la matriz 16×16 la cual presenta una estructura de bloques que simplifica el cálculo. El bloque más grande es de 3×3 y usando la formula de Cardano para resolver la ecuación algebraica de tercer grado asociada, los resultados de este cálculo se presentan en la Tabla **A-2**.

Para obtener las funciones de Green atómicas localizadas de la impureza con el límite de ancho de banda cero se usa la ecuación de Zubarev [11]

$$g_{\alpha, \alpha'}^{ff, at}(i\omega_s) = -e^{\beta\Omega} \sum_{n, r, r'} \frac{\exp(-\beta\epsilon_{n-1, r}) + \exp(-\beta\epsilon_{n, r'})}{i\omega_s + \epsilon_{n-1, r} - \epsilon_{n, r'}} \times \langle n-1, r | X_{j, \alpha} | n, r \rangle \quad (\text{A-1})$$

Donde Ω es el potencial termodinámico, E_{nj} son los valores propios y $|nj\rangle$ los vectores propios correspondientes a la solución completa del Hamiltoniano. Resultando

$$G^{ff, at}(\omega) = e^{\rho\Omega} \sum_{i=1}^{16} \frac{m_i}{\omega - u_i} \quad (\text{A-2})$$

donde u_i son los polos de la función de Green dados en la tabla **A-3**.

Tabla **A-1.**: Autoestados para el modelo de la impureza de Anderson en el limite $2D = V = 0$. Las columnas indican los estados $|n, \sigma\rangle$, las energías E_i , el número de electrones n y la componente de espín S_z [5].

$ m, \sigma\rangle$	E_i	n	S_z
$ 0, 0\rangle$	0	0	0
$ +, 0\rangle$	ϵ_0	1	$\frac{1}{2}$
$ 0, \uparrow\rangle$	ϵ_q	1	$\frac{1}{2}$
$ -, 0\rangle$	ϵ_f	1	$-\frac{1}{2}$
$ 0, \downarrow\rangle$	ϵ_q	1	$-\frac{1}{2}$
$ +, \uparrow\rangle$	$\epsilon_f + \epsilon_q$	2	1
$ -, \downarrow\rangle$	$\epsilon_f + \epsilon_q$	2	-1
$ +, \downarrow\rangle$	$\epsilon_f + \epsilon_q$	2	0
$ -, \uparrow\rangle$	$\epsilon_f + \epsilon_q$	2	0
$ 0, \uparrow\downarrow\rangle$	$2\epsilon_q$	2	0
$ d, 0\rangle$	$2\epsilon_f + U$	2	0
$ d, \uparrow\rangle$	$2\epsilon_f + \epsilon_q + U$	3	$\frac{1}{2}$
$ +, \uparrow\downarrow\rangle$	$\epsilon_f + 2\epsilon_q$	3	$\frac{1}{2}$
$ d, \downarrow\rangle$	$2\epsilon_f + \epsilon_q + U$	3	$-\frac{1}{2}$
$ -, \uparrow\downarrow\rangle$	$\epsilon_f + 2\epsilon_q$	3	$-\frac{1}{2}$
$ d, \uparrow\downarrow\rangle$	$2\epsilon_f + 2\epsilon_q + U$	4	0

Tabla **A-2.**: Autoenergías $E_{n,r}$ para los dieciséis estados $|n, r\rangle$ de \mathcal{H} de la solución exacta del modelo de la impureza de Anderson en el límite $2D = V = 0$. Donde n es el número de electrones, r es el nombre del estado y S_z es la componente de espín en dirección z [5].

Autoestados $ j\rangle = n, j\rangle$	Autoenergías $E_j \equiv E_{nr}$	n	S_z
$ 1\rangle = 0, 1\rangle = 0, 0\rangle$	$E_1 \equiv E_{0,1} = 0$	0	0
$ 2\rangle = 1, 1\rangle = \cos\phi +, 0\rangle - \sin\phi 0, \uparrow\rangle$	$E_2 \equiv E_{1,1} = \frac{1}{2}(\epsilon_f + \epsilon_q - \Delta)$	1	$+\frac{1}{2}$
$ 3\rangle = 1, 2\rangle = \cos\phi -, 0\rangle - \sin\phi 0, \downarrow\rangle$	$E_3 \equiv E_{1,2} = E_2$	1	$-\frac{1}{2}$
$ 4\rangle = 1, 3\rangle = \sin\phi +, 0\rangle + \cos\phi 0, \uparrow\rangle$	$E_4 \equiv E_{1,3} = \frac{1}{2}(\epsilon_f + \epsilon_q + \Delta)$	1	$+\frac{1}{2}$
$ 5\rangle = 1, 4\rangle = \sin\phi -, 0\rangle + \cos\phi 0, \downarrow\rangle$	$E_5 \equiv E_{1,4} = E_4$	1	$-\frac{1}{2}$
$ 6\rangle = 2, 1\rangle = +, \uparrow\rangle$	$E_6 \equiv E_{2,1} = \epsilon_f + \epsilon_q$	2	1
$ 7\rangle = 2, 2\rangle = -, \downarrow\rangle$	$E_7 \equiv E_{2,2} = E_6$	2	-1
$ 8\rangle = 2, 3\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(+, \downarrow\rangle + -, \uparrow\rangle)$	$E_8 \equiv E_{2,3} = E_7$	2	0
$ 9\rangle = 2, 4\rangle = a_9[+, \downarrow\rangle - -, \uparrow\rangle] + b_9 d, 0\rangle + c_9 0, \uparrow\downarrow\rangle$	$E_9 \equiv E_{2,4} = 2\sqrt{-Q} \cos\left(\frac{\theta_1}{3}\right)$	2	0
$ 10\rangle = 2, 5\rangle = a_{10}[+, \downarrow\rangle - -, \uparrow\rangle] + b_{10} d, 0\rangle + c_{10} 0, \uparrow\downarrow\rangle$	$E_{10} \equiv E_{2,5} = 2\sqrt{-Q} \cos\left(\frac{\theta_1+2\pi}{3}\right)$	2	0
$ 11\rangle = 2, 6\rangle = a_{11}[+, \downarrow\rangle - -, \uparrow\rangle] + b_{11} d, 0\rangle + c_{11} 0, \uparrow\downarrow\rangle$	$E_{11} \equiv E_{2,6} = 2\sqrt{-Q} \cos\left(\frac{\theta_1+4\pi}{3}\right)$	2	0
$ 12\rangle = 3, 1\rangle = \sin\theta d, \uparrow\rangle + \cos\theta +, \uparrow\downarrow\rangle$	$E_{12} \equiv E_{3,1} = \frac{1}{2}(3\epsilon_f + 3\epsilon_q + U + U')$	3	$+\frac{1}{2}$
$ 13\rangle = 3, 2\rangle = \sin\theta d, \downarrow\rangle + \cos\theta -, \uparrow\downarrow\rangle$	$E_{13} \equiv E_{3,2} = E_{1,2}$	3	$-\frac{1}{2}$
$ 14\rangle = 3, 3\rangle = -\cos\theta d, \uparrow\rangle + \sin\theta +, \uparrow\downarrow\rangle$	$E_{14} \equiv E_{3,3} = \frac{1}{2}(3\epsilon_f + 3\epsilon_q + U - \Delta')$	3	$+\frac{1}{2}$
$ 15\rangle = 3, 4\rangle = -\cos\theta d, \downarrow\rangle + \sin\theta -, \uparrow\downarrow\rangle$	$E_{15} \equiv E_{3,4} = E_{1,4}$	3	$-\frac{1}{2}$
$ 16\rangle = 4, 1\rangle = d, \uparrow\downarrow\rangle$	$E_{16} \equiv E_{4,1} = 2\epsilon_f + 2\epsilon_q + U$	4	0

En la tabla **A-2** se usaron las abreviaciones $|j\rangle = |n, r\rangle$ y $E_j \equiv E_{n,r}$ con $j = 1, \dots, 16$. $\epsilon_{n,r} = E_{n,r} - n\mu$. Los parámetros

$$\Delta = [(\epsilon_f + \epsilon_q)^2 + 4V^2]^{1/2} \quad (\text{A-3})$$

$$\Delta' = [(\epsilon_f + U - \epsilon_q)^2 + 4V^2]^{1/2} \quad (\text{A-4})$$

$$\tan \phi = 2V / (\epsilon_q - \epsilon_f + \Delta) \quad (\text{A-5})$$

$$\tan \theta = 2V / (\epsilon_f + U - \epsilon_q - \Delta') \quad (\text{A-6})$$

$$a_i = \left(2 + 4V^2 \left[(E_i - \epsilon_f - U)^{-2} + (E_i - 2\epsilon_q)^{-2} \right] \right)^{-1/2} \quad (\text{A-7})$$

$$b_i = \frac{2V}{E_i + 2\epsilon_f - U} \quad (\text{A-8})$$

$$c_i = \frac{2V}{E_9 - 3\epsilon_q} \quad (\text{A-9})$$

$$i = 9, 10, 11 \quad (\text{A-10})$$

$$\theta_1 = \arccos \frac{R}{\sqrt{-Q^3}} \quad (\text{A-11})$$

$$Q = -\frac{1}{9} \left[12V^2 + (\epsilon_q + \epsilon_f) + (2\epsilon_f + U)^2 + (2\epsilon_q) - (\epsilon_q)^2 - (\epsilon_q + \epsilon_f) (2\epsilon_f + U) \right] \quad (\text{A-12})$$

$$R = \frac{1}{54} \left\{ -3 \left[(\epsilon_q + \epsilon_f)^2 (2\epsilon_f + U + 2\epsilon_q) + (2\epsilon_f + U)^2 (\epsilon_q + \epsilon_f + 2\epsilon_q) + (2\epsilon_q)^2 (\epsilon_q + \epsilon_f + 2\epsilon_f + U) \right] + \right. \\ \left. + 2 (\epsilon_q + \epsilon_f) (2\epsilon_f + U) (2\epsilon_q) + 18V^2 [2 (\epsilon_q + \epsilon_f) - (2\epsilon_f + U) - (2\epsilon_q)] + 2 [(\epsilon_q + \epsilon_f)^3 + (2\epsilon_f + U)^3 + (2\epsilon_q)^3] \right\} \quad (\text{A-13})$$

Tabla **A-3.**: Polos de las funciones de Green correspondientes a todos las posibles transiciones en la solución atómica [5].

$u_1 = E_2 - E_1 = E_6 - E_4$
$u_2 = E_5 - E_1 = E_6 - E_2$
$u_3 = E_{10} - E_2$
$u_4 = E_{11} - E_2$
$u_5 = E_9 - E_2$
$u_6 = E_{10} - E_4$
$u_7 = E_{12} - E_6 = E_{16} - E_{14}$
$u_8 = E_{12} - E_9$
$u_9 = E_{12} - E_{10}$
$u_{10} = E_{12} - E_{11}$
$u_{11} = E_{14} - E_{10}$
$u_{12} = E_{14} - E_{11}^1$
$u_{13} = E_9 - E_4$
$u_{14} = E_{11} - E_4$
$u_{15} = E_{14} - E_6 = E_{16} - E_{12}$
$u_{16} = E_{14} - E_9$

Siguiendo la definición de cumulantes (ecuaciones A-13 y A-14) se escriben todas las funciones de Green empleadas en el cálculo de la aproximación atómica

$$G_{\uparrow}^{ff,at} \begin{pmatrix} g_{11} & g_{13} \\ g_{31} & g_{33} \end{pmatrix}; \quad G_{\downarrow}^{ff,at} \begin{pmatrix} g_{22} & g_{24} \\ g_{42} & g_{44} \end{pmatrix} \quad (\text{A-14})$$

$$g_{11} = e^{\beta\Omega} \left\{ \left[\sin^2 \phi \left(\frac{e^{-\beta E_1} + e^{-\beta E_4}}{i\omega + E_1 - E_4} + \frac{3}{2} \frac{e^{-\beta E_2} + e^{-\beta E_6}}{i\omega + E_2 - E_6} \right) + \cos^2 \phi \left(\frac{e^{-\beta E_1} + e^{-\beta E_2}}{i\omega + E_1 - E_2} + \frac{3}{2} \frac{e^{-\beta E_4} + e^{-\beta E_6}}{i\omega + E_4 - E_6} \right) \right] + \sum_{i=9}^{11} \left[\frac{e^{-\beta E_3} + e^{-\beta E_1}}{i\omega + E_3 - E_i} (a_i \sin \phi)^2 + \frac{e^{-\beta E_5} + e^{-\beta E_i}}{i\omega + E_5 - E_i} (a_i \cos \phi)^2 + \frac{e^{-\beta E_i} + e^{-\beta E_{14}}}{i\omega + E_i - E_{14}} (c_i \sin \phi)^2 + \frac{e^{-\beta E_i} + e^{-\beta E_{12}}}{i\omega + E_i - E_{12}} (c_i \cos \phi)^2 \right] \right\} \quad (\text{A-15})$$

$$g_{33} = e^{\beta\Omega} \left\{ \left[\sin^2 \theta \left(\frac{e^{-\beta E_{15}} + e^{-\beta E_{16}}}{i\omega + E_{15} - E_{16}} + \frac{3}{2} \frac{e^{-\beta E_8} + e^{-\beta E_{12}}}{i\omega + E_8 - E_{12}} \right) + \cos^2 \theta \left(\frac{e^{-\beta E_{13}} + e^{-\beta E_{16}}}{i\omega + E_{13} - E_{16}} + \frac{3}{2} \frac{e^{-\beta E_8} + e^{-\beta E_{14}}}{i\omega + E_8 - E_{14}} \right) \right] + \sum_{i=9}^{11} \left[\frac{e^{-\beta E_4} + e^{-\beta E_i}}{i\omega + E_4 - E_i} (b_i \sin \phi)^2 + \frac{e^{-\beta E_3} + e^{-\beta E_i}}{i\omega + E_3 - E_i} (b_i \cos \phi)^2 + \frac{e^{-\beta E_i} + e^{-\beta E_{12}}}{i\omega + E_i - E_{12}} (a_i \sin \theta)^2 + \frac{e^{-\beta E_i} + e^{-\beta E_{14}}}{i\omega + E_i - E_{14}} (a_i \cos \theta)^2 \right] \right\} \quad (\text{A-16})$$

$$g_{13} = e^{\beta\Omega} \sum_{i=9}^{11} \left\{ \left[\frac{e^{-\beta E_5} + e^{-\beta E_i}}{i\omega + E_5 - E_i} - \frac{e^{-\beta E_3} + e^{-\beta E_i}}{i\omega + E_3 - E_i} \right] a_i b_i \sin \phi \cos \phi + \left[\frac{e^{-\beta E_i} + e^{-\beta E_{14}}}{i\omega + E_i - E_{14}} - \frac{e^{-\beta E_i} + e^{-\beta E_{12}}}{i\omega + E_i - E_{12}} \right] a_i c_i \cos \theta \sin \theta \right\} \quad (\text{A-17})$$

$$g_{13} = g_{31} \quad (\text{A-18})$$

$$g_{22} = e^{\beta\Omega} \left\{ \left[\sin^2 \phi \left(\frac{e^{-\beta E_1} + e^{-\beta E_5}}{i\omega + E_1 - E_5} + \frac{3}{2} \frac{e^{-\beta E_3} + e^{-\beta E_7}}{i\omega + E_3 - E_7} \right) + \cos^2 \phi \left(\frac{e^{-\beta E_1} + e^{-\beta E_3}}{i\omega + E_1 - E_3} + \frac{3}{2} \frac{e^{-\beta E_5} + e^{-\beta E_7}}{i\omega + E_5 - E_7} \right) \right] + \sum_{i=9}^{11} \left[\frac{e^{-\beta E_2} + e^{-\beta E_i}}{i\omega + E_2 - E_i} (a_i \sin \phi)^2 + \frac{e^{-\beta E_4} + e^{-\beta E_i}}{i\omega + E_4 - E_i} (a_i \cos \phi)^2 + \frac{e^{-\beta E_i} + e^{-\beta E_{15}}}{i\omega + E_i - E_{15}} (c_i \sin \theta)^2 + \frac{e^{-\beta E_i} + e^{-\beta E_{13}}}{i\omega + E_i - E_{13}} (c_i \cos \theta)^2 \right] \right\} \quad (\text{A-19})$$

$$g_{44} = e^{\beta\Omega} \left\{ \left[\sin^2 \theta \left(\frac{e^{-\beta E_{14}} + e^{-\beta E_{16}}}{i\omega + E_{14} - E_{16}} + \frac{3}{2} \frac{e^{-\beta E_6} + e^{-\beta E_{12}}}{i\omega + E_6 - E_{12}} \right) + \cos^2 \theta \left(\frac{e^{-\beta E_{12}} + e^{-\beta E_{16}}}{i\omega + E_{12} - E_{16}} + \frac{3}{2} \frac{e^{-\beta E_6} + e^{-\beta E_{14}}}{i\omega + E_6 - E_{14}} \right) \right] + \sum_{i=9}^{11} \left[\frac{e^{-\beta E_4} + e^{-\beta E_i}}{i\omega + E_4 - E_i} (b_i \sin \phi)^2 + \frac{e^{-\beta E_2} + e^{-\beta E_i}}{i\omega + E_2 - E_i} (b_i \cos \phi)^2 + \frac{e^{-\beta E_i} + e^{-\beta E_{12}}}{i\omega + E_i - E_{12}} (a_i \sin \theta)^2 + \frac{e^{-\beta E_i} + e^{-\beta E_{14}}}{i\omega + E_i - E_{14}} (a_i \cos \theta)^2 \right] \right\} \quad (\text{A-20})$$

$$g_{24} = g_{42} \quad (\text{A-21})$$

Apéndice tomado de la referencia [8]

Bibliografía

- [1] ANDERSON, Philip W.: Localized Magnetic States in Metals. En: *Phys. Rev.* doi:10.1103/PhysRev.124.41 (1961)
- [2] FONSECA, Thiago L.: *Método atómico para o modelo de Anderson com correlacao coulombiana finita*, Instituto de Física Universidade Federal Fluminense, Tese de doutoramento, 2009
- [3] GAMMON, Daniel ; STEEL, Duncan G.: *Optical Studies of Single Quantum Dots*. 1. *Physcis Today* 55 N.10 p.36, 2002
- [4] LEO KOWWENHOVEN, Leonid G.: *Revival of the Kondo effect*, *Physics World*, 14(1):33-28, ISSN 0953-8585, 2058-7058. doi:10.1088/2058- 7058/14/1/28, January 2001.
- [5] LOBO, M. E. ; FOGLIO, M. E. ; FIGUEIRA, M. S. *Nanotechnology*, **21** (274007). 2010
- [6] LOBO, M. E. ; FOGLIO, M. E. ; FIGUEIRA, M. S. *Green's functions for the Anderson model: the atomic approximation*. ([arXiv:0903.0139v1](https://arxiv.org/abs/0903.0139v1)), 2009
- [7] PHYSICS, Nature: *Still irresistible*, 10(5): 329-329, ISSN 1745-2473, 1745-2481. doi: 10.1038/nphys2972, May 2014.
- [8] RAMOS, E.: *Propiedades Termoeléctricas y Transporte en Nanoestructuras: Aproximación Coulombiana Finita (U-fínito) para el Modelo de la Impureza de Anderson*, Universidad Nacional de Colombia, Tesis de maestría, 2014.
- [9] W. J. DE HASS, J. De B. ; G.J., Van Den B.: *The Electrical Resistance of Gold, Copper and Lead at Low Temperatures*, *Physica*, 1:1115-1124, doi: 10.1016/S0031-8914(34)80310-2, May 1934.
- [10] W. MEISSNER, G. V. *Ann. Physik.* 7. 1930