

UNIVERSIDADE FEDERAL DE UBERLÂNDIA
Programa de Pós - Graduação - INFIS
Gilmar Régis de Sousa

Impurezas quânticas em sistemas com interação spin-órbita

Uberlândia

2016

UNIVERSIDADE FEDERAL DE UBERLÂNDIA
Programa de Pós - Graduação - INFIS
Gilmar Régis de Sousa

Impurezas quânticas em sistemas com interação spin-órbita

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-graduação em Física da Universidade Federal de Uberlândia, como requisito parcial para obtenção do título de mestre em Física Teórica.

Área de Concentração: Física da Matéria Condensada

Orientador:
Prof. Dr. Edson Vernek

Uberlândia

2016

Dados Internacionais de Catalogação na Publicação (CIP)
Sistema de Bibliotecas da UFU, MG, Brasil.

S725i Sousa, Gilmar Regis de, 1984-
2016 Impurezas quanticas em sistemas com interação spin-órbita / Gilmar
Regis de Sousa. - 2016.
 76 f. : il.

Orientador: Edson Vernek.
Dissertação (mestrado) - Universidade Federal de Uberlândia,
Programa de Pós-Graduação em Física.
Inclui bibliografia.

1. Física - Teses. 2. Kondo, Efeito - Teses. I. Vernek, Edson. II.
Universidade Federal de Uberlândia. Programa de Pós-Graduação em
Física. III. Título.

CDU: 53



SERVIÇO PÚBLICO FEDERAL
MINISTÉRIO DA EDUCAÇÃO
UNIVERSIDADE FEDERAL DE UBERLÂNDIA
INSTITUTO DE FÍSICA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA



GILMAR REGIS DE SOUSA

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-graduação em Física, do Instituto de Física, da Universidade Federal de Uberlândia, como requisito parcial para obtenção do título de Mestre em Física.

Uberlândia, 30 de setembro de 2016.

BANCA EXAMINADORA

Prof. Dr. Edson Vernek
Instituto de Física- UFU

Prof. Dr. Raimundo Lora Serrano
Universidade Federal de Uberlândia - UFU

Prof. Dr. George Balster Martins
Universidade Federal Fluminense - UFF

Resumo

Os efeitos da interação spin-órbita em sistemas com impurezas Kondo tem sido tema de estudo nas últimas décadas com debates mais intensos nos anos mais recentes. Muito desse interesse se deve à importância que a interação spin-orbita tem ganhado nos últimos anos no contexto da física da matéria condensada. Nesse trabalho revisitamos esse problema no contexto de sistemas unidimensionais com forte interação spin-órbita do tipo Rashba e Dresselhaus. Especificamente, investigamos como a interação spin-orbita modifica a temperatura Kondo (T_K) do sistema. Para abordar esse problema começamos por descrever o sistema pelo modelo de Anderson, levando em conta a interação spin-orbita para os elétrons de condução. A partir desse modelo derivamos um Hamiltoniano efetivo do tipo Kondo que além de descrever o efeito Kondo convencional apresenta também dois termos adicionais. O primeiro descreve a conhecida interação Dzyaloshinskii-Moryia. O segundo descreve processos de espalhamento de elétrons semelhantes aos descritos por Elliot-Yafet. Para determinar os efeitos da interação spin-órbita na temperatura Kondo, realizamos uma análise do Hamiltoniano efetivo via grupo de renormalização. Nossa estudo mostra que, devido a uma renormalização do acoplamento Kondo, há um aumento de T_K com o aumento da interação spin-órbita. Isso ocorre mesmo no ponto de simetria partícula-buraco, diferindo dos resultados recentes usando uma análise semelhante. Os termos adicionais que surgem no Hamiltoniano também contribuem para um aumento da temperatura Kondo fora da simetria partícula-buraco. Além disso, a combinação dos termos de Dzyaloshinskii-Moryia e Elliot-Yafet produzem uma dependência na temperatura Kondo com o acoplamento spin-orbita que é assimétrica em relação à mudanças da posição do nível da impureza em torno do ponto de simetria partícula-buraco.

Palavras Chaves: Efeito Kondo, Intereração spin-órbita, Grupo de renormalização.

Abstract

The effects of the spin-orbit interaction in systems with Kondo impurity has been a subject of study in recent decades with more intense discussions in recent years. Much of this interest is stimulated by the importance that the spin-orbit interaction has gained in the recent years in the context of condensed matter physics. In this work we revisit this problem in one-dimensional systems with strong Rashba as well as Dresselhaus spin-orbit interactions. More specifically, we investigate how the spin-orbit interaction modifies the Kondo temperature (T_K) of the system. We begin by describing the system via the Anderson model, taking into account the spin-orbit interactions for the conduction electrons. From this model we derive an effective Kondo-like Hamiltonian that describes not only the conventional Kondo effect, but also accounts for two additional terms. The first term describes the known Dzyaloshinskii-Moriya interaction, while the second one describes electron scattering processes similar to those described by Elliot-Yafet. To determine the effects of the spin-orbit interaction on T_K , we analyze the effective Hamiltonian via renormalization group. Our study shows that, due to a renormalization of the Kondo coupling, there is an increase of the Kondo temperature with increasing spin-orbit interaction. This occurs even at the particle-hole symmetry point, differing from recent results in the literature. The additional terms that appear in the Hamiltonian also contribute to the increase of T_K away from the particle-hole symmetry. Moreover, the combination of the Dzyaloshinskii-Moriya and Elliot-Yafet mechanisms produce a dependency of the Kondo temperature on the spin-orbit coupling that is asymmetric regarding displacements of the impurity level position around the particle-hole symmetric point.

Keywords: Kondo effect, Spin-orbit interaction, Renormalization group

”A sabedoria oferece proteção, como o faz o dinheiro, mas a vantagem do conhecimento é esta: a sabedoria preserva a vida de quem a possui.” Eclesiastes 7:12.

AGRADECIMENTOS

Quero manifestar aqui meus agradecimentos:

- Primeiramente a Deus pela sabedoria e força para continuar.
- À minha mãe Aparecida ao meu pai Gilberto e à minha irmã Gislaine e minha namorada Jéssica Pereira pelo apoio.
- Aos meus irmãos em Cristo e amigos que estiveram sempre comigo durante o desenvolvimento deste trabalho.
- Ao querido e saudoso Prof. Dr. Milton Taidi Sonoda pelos incentivos e conselhos durante a graduação.
- Aos amigos de longa data (não vou citar nomes, pois são muitos) e aos amigos de laboratório, Bruno e Joelson pela as excelentes discussões sobre qualquer assunto e do grupo filosofia fim de tarde. Quero também deixar os meus agradecimentos as grandes amizades Gabriel, Maryzaura, Giselle, Robert, Diego e Renan.
- Ao meu orientador Prof. Edson Vernek pela paciência e ótimo trabalho.
- Agradecimentos ao Prof Dr. Gerson J. Ferreira pelas sugestões e discussões no desenvolvimento dessa dissertação.
- Agradecimentos ao Joelson F. Silva por sua contribuição ao trabalho.
- A todos os funcionários do instituto de física, especialmente aos funcionários da secretaria da pós-graduação.
- Por fim, à agência CAPES pelo apoio financeiro.

Sumário

Lista de Figuras

1	Introdução	p. 7
1.1	Efeito Kondo	p. 8
1.2	Interação spin-órbita	p. 10
1.3	Objetivos e metodologia	p. 12
2	Modelo microscópico de impurezas magnéticas na presença de interação spin-órbita	p. 14
2.1	Modelo Kondo	p. 14
2.2	Modelo de Anderson	p. 14
2.3	O Hamiltoniano spin-órbita em duas dimensões	p. 18
2.4	O Hamiltoniano spin-órbita em uma dimensão	p. 21
3	Modelo efetivo	p. 25
3.1	Projeção do Hamiltoniano	p. 25
3.2	Hamiltoniano efetivo na base <i>up</i> e <i>down</i>	p. 35
4	Cálculo de T_K via grupo de renormalização	p. 39
4.1	Poor Man's Scaling	p. 40
4.2	Cálculo numérico de T_K	p. 50
5	Conclusão	p. 53

APÊNDICES	p. 55
Apêndice A – Projeção do Hamiltoniano	p. 55
Apêndice B – Obtenção dos termos de Elliot-Yafet e Dzyaloshinskii-Moriya	p. 61
Apêndice C – Anexos	p. 65
Referências Bibliográficas	p. 67

Lista de Figuras

- 1 Representação esquemática da curva de resistividade observada quando os elétrons blindam a impureza magnética. Esse comportamento pode ser observado em sistemas que apresentam elementos como: Ag, Mg na presença de impurezas do tipo Cr, Mn. Nesses sistemas é possível observar um mínimo na resistividade à medida que diminui-se a temperatura. Grosso modo, é nesse mínimo que define-se a temperatura Kondo como indicado na figura. Figura adaptada a partir de W. J. de Haas and G. J. van den Berg, Physica vol. 3, page 440, 1936 p. 9
- 2 Aqui temos as três configurações possíveis dos níveis de energia da impureza. Podemos observar que a configuração (a), possui ocupação nula, que corresponde ao número de ocupação do nível da impureza, $n_d = 0$ e a energia correspondente $\varepsilon_d = 0$. Na configuração (b), podemos observar que um nível da impureza ocupado por um único elétron que pode ter um índice de spin $\sigma = \uparrow, \downarrow$, ou seja, número de ocupação simples com o operador número $n_d = 1$ e sua energia $\varepsilon_{d,\sigma} = \varepsilon_d$. É nesses estados de ocupação simples que está o grande interesse quando visamos o regime Kondo, pois com elétron *spin-up* ou *spin-down* conduzem a um momento magnético localizado que é central para o fenômeno Kondo. A última configuração representada por (c), é a de ocupação dupla com energia $\varepsilon_2 = 2\varepsilon_d + U$. Devido ao princípio de exclusão de Pauli, o nível de ocupação dupla, $n_d = 2$, necessariamente deve conter elétrons com spins opostos, resultando em um momento magnético nulo. (54) . . . p. 15
- 3 (a) Estado inicial com momento magnético da impureza e o spin do elétron de condução definidos. (b) O estado intermediário é devido ao tunelamento do elétron da impureza para o nível de Fermi. (c) No estado final o elétron da banda de condução tunela para o nível da impureza com spin diferente. Esses são processos de *spin-flip*. p. 16
- 4 Representação de um ponto quântico acoplado a um nanofio com interação spin-órbita. Assumimos o fio na direção x. V_K representa o *hopping* dos elétrons do ponto quântico para o fio. p. 21

- 5 Ilustração interação spin-órbita tipo Rashba. (a) Banda de condução dos elétrons livres com degenerescência de spin dupla na ausência de interação spin-órbita. (b) Na presença do acoplamento spin-órbita tipo Rashba, os elétrons de condução sentem um campo magnético efetivo. Portanto, existe uma quebra de degenerescência de spin na banda de condução. p. 23
- 6 (a) Bandas de spin-órbita para os elétrons de condução. Em baixas temperaturas, os processos permitidos envolvem energias próximo do nível de Fermi ε_F . As setas magenta e roxa exemplificam, respectivamente, os espalhamentos intra-banda (*forward*) e inter-banda (*backward*). As figuras (b) e (c) são diagramas representativos de espalhamentos de processos típicos que está contido no Hamiltoniano 3.37 e 3.40, respectivamente. (58) p. 34
- 7 Representação esquemática dos processos de espalhamento do tipo Elliot-Yafet. Mecanismo está representado pela colisão dos elétrons itinerantes com uma impureza. Temos um elétron com spin *up* e após colidir com a impureza tem o momento invertido. Esse mecanismo não flipa o spin da impureza. p. 37
- 8 Representação esquemática do processo de renormalização via *poor man's scaling*. Partículas e buracos que serão removidos da banda condução através de uma redução de $|\delta D|$. Esses estados são de altas energias (estados intermediário) com energia designadas no texto por ε_q , cujos efeitos sobre os estados remanescentes são levados em conta perturbativamente. p. 40
- 9 Diagramas de Feynman contribuindo para processos segunda-ordem para o caso geral. Aqui p, h representando a helicidade, momento e o spin respectivamente. (a) representa espalhamentos do tipo partículas. Uma partícula com p, h inicial espalha no spin da impureza representado pela letra *A* e em seguida propaga até o segundo espalhamento no spin da impureza representada pela letra *B* e sai com um estado final representado por $p'k', h'$. (b) representa espalhamento do tipo buraco. Neste caso, temos um elétron em um estado $p''q, h''$ que pode ser espalhado com *spin-flip* ou não para um estado final p, h e permanecendo um buraco que será aniquilado por um estado inicial $p'k', h'$ p. 42

- 10 Diagramas de Feynman contribuindo para renormalização de processos de espalhamento tipo partícula em segunda-ordem. (a) representa espalhamentos correspondente a equação (4.9). Um elétron com estado inicial $\pm k, -$ espalha na impureza sem *flip-spin* conduzindo a um estado intermediário $\pm q, -$. O estado $\pm q, -$ então propaga e espalha novamente para um estado final com $\mp k', +$. (b) Em situação semelhante temos espalhamentos correspondente a equação (4.10). p. 44
- 11 Diagramas de Feynman contribuindo para renormalização de processos de espalhamento tipo buraco de segunda-ordem. (a) Representa espalhamentos correspondente a equação (4.22). Neste caso, temos um elétron em um estado $\pm q, -$ que é espalhado sem *spin-flip* para um estado final $\pm k, -$. Esse espalhamento deixa um buraco que será aniquilado por um estado inicial $\pm k', -$. (b) De forma semelhante, representa espalhamentos correspondente a equação (4.23). p. 46
- 12 (a) temperatura Kondo escalada vs γ_F/U para diferentes valores de ε_d e $U = 0.1$. $\varepsilon_d = -0.5U$ corresponde exatamente ao ponto de simetria *particle-hole* do modelo de Anderson. Note que diferentes comportamentos de T_K para ε_d acima e abaixo de 0.05. T_k^0 é a temperatura Kondo calculada na ausência da interação SO, $\gamma = 0$. (b) $\text{Log}(T_K/T_k^0)$ vs γ_F/U (símbolos). As linhas sólidas mostram a conexão entre o primeiro e último ponto de cada conjunto de dados, servindo como um guia para os olhos. Estas linhas sugerem que T_K depende de γ_F exponencialmente como $T_K = T_k^0 \exp(a\gamma_F^2)$, onde a é uma função de ε_d . (c) a/U^2 ε_d/U resultados extraídos do painel (b). p. 51

1 *Introdução*

O problema de impurezas quânticas em estado sólido tem sido tema de estudo desde o estabelecimento da própria mecânica quântica na primeira metade do século passado. Enquanto naquele primeiro momento o estudo de impurezas quânticas em metais era importante para a compreensão das propriedades de transporte eletrônico de condutores, mais tarde os estados ligados às impurezas passaram a ser interessantes por si só, pois permitem o surgimento de novos fenômenos não presentes em sistemas ausentes de impurezas (1, 2). Dentre as impurezas que encontramos em sistemas metálicos, podemos separar grosseiramente entre impurezas que possuem graus de liberdades internos e as que não possuem tais graus de liberdade. Embora essa classificação seja muito rudimentar, ela é extremamente importante para compreender, por exemplo, porque surpreendentemente o modelo de Drude é capaz de descrever de modo bastante razoável o transporte em muitos materiais (3) . O modelo de Drude fracassa, no entanto, quando as impurezas no material possuem graus de liberdade interno (3). Impurezas magnéticas, por exemplo, possuem graus de liberdade internos que podem se acoplar aos spins dos portadores de carga itinerantes do material produzindo, assim, dramáticos efeitos nas suas propriedades de transporte eletrônico (4).

Um destes efeitos é o conhecido efeito Kondo, que tem como característica uma blindagem de muitos corpos do momento magnético localizado pelos spins dos elétrons de condução que ocorre abaixo de uma temperatura característica chamada temperatura Kondo T_K . Originalmente observado em ligas metálicas(5), com características notáveis nas suas propriedades de transporte, este efeito tem sido extensivamente estudado em poucas impurezas magnéticas acopladas a sistemas em uma (6–8) e duas dimensões (9–11). Recentemente, vários estudos tem discutido o efeito da interação spin-órbita (ISO) no regime Kondo em sistemas bidimensionais. Mais especificamente, a questão sobre como a interação spin-órbita modifica o efeito Kondo em sistemas com uma impureza magnética isolada tem ganhado mais atenção (12–19). A influência da ISO na física Kondo tem ganhado maior interesse porque tornou-se extremamente atraente em sistemas da matéria condensada (20, 21). Por exemplo, ISO é um ingrediente básico para muitos diferentes fenômenos, indo desde a manipulação de spin no celebrado transistor Datta-Das (22) até estudos recentes como o efeito *quantum spin-hall* (23)

e Férmions de Majorana (24). Como o efeito Kondo envolve coletivamente os spins dos elétrons itinerantes, não é surpreendente que a interação spin-órbita que acopla o spin do elétron com seu momento orbital, poderá modificá-lo. Contudo, enquanto na Ref. (12) não foi encontrado alteração na temperatura Kondo com ISO, recentes estudos Ref. (13–16) tem encontrado uma alteração na temperatura Kondo com ISO. Além da Ref. (15), que aborda o efeito Kondo no grafeno, outros estudos reportaram resultados discutíveis sobre sistemas semelhantes. Por um lado, na Ref. (12) verificou-se que a ISO do tipo Rashba não provoca nenhum efeito sobre T_K . Por outro lado, na Ref. (13), utilizando análise de grupo de renormalização e nas Refs. (14) e (16), utilizando a técnica grupo de renormalização numérico(NRG), reportou a temperatura Kondo T_k dependente da ISO. Porém, a dependência funcional obtida pelo NRG parece diferir da abordagem do grupo de renormalização. Esta controvérsia pode ser atribuída aos diferentes regimes em que análise foi realizada e, em certas aproximações feitas no RGA. Devemos salientar que a idéia Ref. (12) de estudar o efeito de ISO em T_K usando um modelo Kondo padrão estava incompleta. Isto torna-se aparente na Ref. (13), em que foi mostrado que o modelo Kondo padrão não inclui todos os processos de espalhamento no sistema. Ao projetar o Hamiltoniano total do sistema sobre um subespaço ocupado com um elétron na impureza, derivamos um Hamiltoniano Kondo efetivo, que contém o conhecido termo de interação Dzyaloshinskii-Moriya (DM) e um termo adicional, análogo ao mecanismo de espalhamento *spin-flip* Elliott-Yafet (EY) induzido pela ISO (25, 26, 28, 29). Uma vez que temos obtido nosso Hamiltoniano efetivo tipo Kondo, realizamos uma análise de grupo de renormalização, semelhante ao que foi feito na Ref. (13), de onde extraímos a temperatura Kondo T_K .

1.1 Efeito Kondo

O efeito Kondo é um fenômeno associado ao mínimo da resistividade de um material em função da sua temperatura que ocorre em materiais condutores com impurezas magnética diluídas. Esse fenômeno foi observado na década de 30 do século passado e, devido à falta de compreensão à luz das teorias existentes na época, ficou também conhecido como a catástrofe da resistência mínima. Como esquematizado na figura 1 (30). Ao diminuir-se a temperatura de um material, o comportamento da resistividade era compreendido da seguinte forma: à medida em que diminui-se sua temperatura a resistência deve diminuir monotonicamente já que os mecanismos de espalhamentos por fônlons sofridos pelos elétrons se tornam cada vez menos importantes. Para um condutor espera-se que a resistência se estabilize num valor finito devido às colisões em metais que surgem a partir de espalhamentos dos elétrons de condução pelos núcleos quando vibram sobre as suas posições de equilíbrio (vibrações da rede) conhecido como potenciais espalhadores. (31).

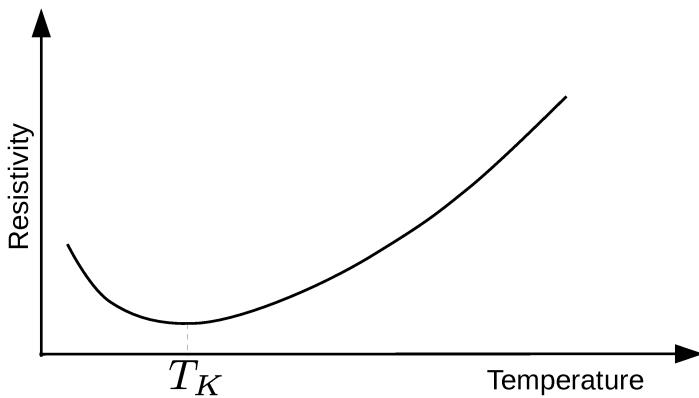


Figura 1: Representação esquemática da curva de resistividade observada quando os elétrons blindam a impureza magnética. Esse comportamento pode ser observado em sistemas que apresentam elementos como: Ag, Mg na presença de impurezas do tipo Cr, Mn. Nesses sistemas é possível observar um mínimo na resistividade à medida que diminui-se a temperatura. Grosso modo, é nesse mínimo que define-se a temperatura Kondo como indicado na figura. Figura adaptada a partir de W. J. de Haas and G. J. van den Berg, Physica vol. 3, page 440, 1936

Por outro lado, para supercondutores, a resistência deve se anular quando a temperatura torna-se menor do que a temperatura crítica dos mesmos. Existem, além disso, alguns compostos para os quais, à medida em a temperatura é reduzida, a sua resistividade atinge um mínimo de uma temperatura característica T_K (temperatura Kondo) abaixo da qual a resistividade começa a aumentar(32, 33). O fenômeno da resistência mínima descrito acima intrigou os físicos por cerca de três décadas até que em 1964 o físico japonês Jun Kondo explicou o fenômeno (5). De acordo com Kondo, o aumento da resistência do material resulta da interação entre elétrons livres e o íon magnético (impurezas magnéticas) a baixas temperaturas. Assim, quando a impureza magnética é depositada em um metal hospedeiro, os elétrons livres do metal interagem de forma antiferromagnética com a impureza. Produzindo assim uma blindagem dinâmica da impureza por uma nuvem envolvendo um grande número de elétrons livres do material. Essa blindagem coletiva pelos elétrons próximos à impureza acaba por dificultar a condução dos elétrons no material, que se manifesta num aumento da resistividade (5). Como já antecipamos acima, o efeito Kondo decorre do acoplamento entre os graus de liberdade da impureza (localizada) e os spins dos elétrons itinerantes do material. É natural perguntar-nos o que acontece quando os spins dos elétrons itinerantes acoplam-se aos outros graus de liberdade. É bem conhecido que em muitos materiais, devido à interação spin-órbita (um efeito intrinsecamente relativístico) os spins dos elétrons se acoplam aos seus momentos lineares produzindo assim "graus de liberdade combinados" onde spin e momento linear se tornam interdependentes (34).

Recentemente o problema da interação de impurezas em sistemas com interação spin-órbita volta

a ser foco de atenção no contexto de supercondutores topológicos, campo em que se procura por estados ligados de Majorana. Deve-se destacar que nesses sistemas, a interação spin-órbita não é o ingrediente suficiente, mas juntamente com um supercondutividade induzida e campo magnético externo, forma-se um tripé fundamental para as condições adequadas ao aparecimentos de estados ligados de Majorana. Embora os supercondutores topológicos não sejam tema dessa dissertação, no seu contexto, a compreensão detalhada da física de uma impureza magnética acoplada a sistemas com forte interação spin-órbita torna-se importante. No que segue vamos discutir um pouco sobre da interação spin-órbita e efeito Kondo, a fim de esclarecer nossos objetivos e resultados.

1.2 Interação spin-órbita

O estudo da interação spin-órbita remete ao estudo da mecânica quântica relativística de Dirac, onde o spin emerge naturalmente como um grau de liberdade intrínseco do elétron, que nesse contexto tem sua dinâmica descrita pela equação relativística de Dirac (35). A interação spin-órbita pode ser interpretada como o acoplamento do spin do elétron com o seu movimento orbital devido ao fato de o elétron se deslocar numa região do espaço permeada por um campo elétrico (36). Em estado sólido, tais campos elétricos podem ser aplicados por um agente exterior ao material ou surgir da estrutura cristalina do sólido. Aqui estaremos interessados na interação spin-órbita em um gás de elétrons bidimensional formado na interface entre dois materiais semicondutores distintos. Nesse caso, devido à assimetria do gap dos dois materiais há uma distorção no perfil de potencial, os elétrons que se deslocam no plano formado pela interface sentem um campo elétrico perpendicular a esse plano, dando origem à interação spin-órbita. Devido à origem da assimetria ser estrutural, o que conseguimos por métodos de fabricação, denominamos *structural inversion asymmetry* (SIA). Por outro lado, quando a assimetria vem da rede cristalina recebe o nome de *bulk inversion asymmetry* (BIA). A importância de sistemas que possuem quebra de inversão de simetria e, como consequência, a presença de acoplamento spin-órbita, vem do fato que campos efetivos poderão surgir nesses materiais. Assim, aumentando as possibilidades de interações que conduzem às diversas alterações nas propriedades estudadas.

Dependendo dos materiais e a forma de crescimento, dois tipos de interação spin-órbita podem ocorrer. As do tipo Rashba (devido a SIA) (37) e Dresselhaus (devido a BIA) (38). Por exemplo, essas são as opções se o cristal possuir uma estrutura do tipo blenda de zinco. Essas interações receberam os nomes dos físicos que propuseram sua origem. Se estabelecermos com o plano xy o plano do gás

de elétrons, a interação Rashba pode ser descrita pelo seguinte Hamiltoniano Ref. (37)

$$H_{SO} = \frac{\alpha}{\hbar} (\sigma \times \mathbf{k}) \cdot \hat{\mathbf{z}}, \quad (1.1)$$

onde σ são as matrizes de Pauli, α é a constante de acoplamento da interação spin-órbita tipo Rashba e $\hat{\mathbf{z}}$ é o vetor unitário ao longo da direção z (perpendicular ao plano). O correspondente Hamiltoniano de interação Dresselhaus é dado pela soma do produto das matrizes de Pauli e combinações de termos lineares dos vetores de onda \mathbf{k} Ref. (38). Considerando apenas o termo linear de Dresselhaus o mesmo pode ser escrito da seguinte forma (39)

$$H_{SO} = \frac{\beta}{\hbar} [\sigma \cdot (\hat{\mathbf{z}} \times \tilde{\mathbf{k}})], \quad (1.2)$$

onde β é a constante de acoplamento da interação spin-órbita tipo Dresselhaus. Aqui $\tilde{\mathbf{k}}$ é um outro vetor de onda e suas componentes são especificadas por uma rotação $\tilde{k}_x = k_y$ e $\tilde{k}_y = k_x$ (39). O Hamiltoniano total que descreve elétrons em um gás no plano xy que inclui os dois tipos de interação spin-órbita resulta, portanto (??),

$$H_{RD} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \alpha(k_y \sigma_x - k_x \sigma_y) + \beta(k_x \sigma_x - k_y \sigma_y), \quad (1.3)$$

onde k_x e k_y são as componentes do momento linear do elétron no plano xy , m representa a massa efetiva do elétron e α e β já foram definidas acima. Esse Hamiltoniano tornou-se importante porque com ele foi previsto o fenômeno conhecido como *persistent spin helix* (PSH), em que estruturas helicoidais de spin possuem longo tempo de relaxação no material devido a uma simetria SU(2)¹ emergente no sistema (??).

O campo de estudo focado no efeito Rashba (SIA) em sistemas bi-dimensionais tem grande interesse, devido a possibilidade de manipular o spin do elétron através da aplicação de um campo elétrico externo, que distorce a banda de condução dos elétrons na direção do campo aplicado. Campos elétricos microscópicos também podem surgir de impurezas carregadas que quebram a simetria de inversão localmente, causando uma interação spin-órbita do tipo SIA (41)-(51). O fato que a interação spin-órbita quebra a degenerescência de spin pode dar origem à um grande número de diversos fenômenos físicos e suas caracterizações. O controle desses fenômenos é de suma importância para a física de spin. A orientação do spin e de seu vetor de onda depende de parâmetros macroscópicos tais como a orientação da estrutura, temperatura, densidade eletrônica, etc. Consequentemente, o fato da interação spin-órbita estar presente afeta fortemente estes parâmetros e requer

¹Grupo especial unitário ou grupo unitário especial de grau n , denotado por $SU(n)$, é o grupo das matrizes complexas n por n e com determinante um. Aqui os geradores de rotação do $SU(2)$ é representado pelas matrizes de Pauli

um método detalhado de estudo. Nesse trabalho vamos estudar os efeitos dessa interação no regime Kondo.

1.3 Objetivos e metodologia

Motivados pelas recentes investigações sobre o efeito Kondo em sistemas com interação spin-orbita e as controvérsias com relação aos efeitos na temperatura Kondo, discutidos acima, vamos revisitá-lo com foco no contexto de sistemas unidimensionais. O nosso interesse em sistemas unidimensionais justifica-se pelas peculiaridades da interação spin-órbita e sua possibilidade de aplicação em sistemas reais como fios quânticos e estados de borda de isolantes topológicos bidimensionais. Especificamente, vamos investigar o efeito Kondo de uma impureza magnética acoplada a um fio quântico com ambas as interações spin-órbita Rashba Ref. (37) e Dresslhaus Ref. (38). Aqui estaremos estritamente interessados na influência da ISO na temperatura Kondo do sistema. Para a impureza, vamos limitar-nos a um momento magnético de spin-1/2 acoplados aos elétrons de condução do fio com interações spin órbita mencionados.

Começaremos por descrever a impureza por um Hamiltoniano de Anderson, em que a impureza possui apenas um nível interagente acoplado por tunelamento aos elétrons de condução no fio quântico. Como estaremos interessados no regime Kondo do sistema, vamos procurar um Hamiltoniano efetivo que descreva o efeito Kondo. Para isso vamos projetar o Hamiltoniano total do sistema sobre um subespaço de um único elétron na impureza de modo que a impureza tenha apenas graus de liberdade de spin, necessários ao efeito Kondo. Isso será feito utilizando o conhecido método dos operadores de projeção, que é equivalente à transformação canônica de Schrieffer-Wolf (52). Para estudar a temperatura Kondo do sistema vamos adotar o método do grupo de renormalização para estudar o ponto fixo do sistema no regime de interesse na presença da interação spin-orbita. Aqui vamos usar a técnica chamada *poor man scaling*, que consiste em reduzir a largura da banda de condução mediante a renormalização dos parâmetros do Hamiltoniano efetivo. Isso nos permite obter um conjunto de equações diferenciais acopladas para os acoplamentos efetivos, cuja solução fornece a temperatura Kondo do sistema, que aqui dependerá, obviamente, da interação spin-orbita. Vamos perceber que na presença da interação spin-orbita, não podemos resolver o sistema analiticamente, de sorte que precisamos utilizar uma solução numérica que nos fornecerá a temperatura Kondo do sistema.

Esta dissertação está organizada da seguinte maneira: No capítulo 2 apresentamos uma discussão sobre os modelos de impureza magnética na presença da interação spin-orbita. No capítulo 3 deduzi-

remos o Hamiltoniano efetivo que descreve o sistema no regime Kondo. No capítulo 4 apresentamos a análise do grupo de renormalização, via *Poor Man's Scaling*, de onde extrairemos o comportamento da temperatura Kondo. Finalmente, no capítulo 5 apresentaremos nossas conclusões e perspectivas.

2 *Modelo microscópico de impurezas magnéticas na presença de interação spin-órbita*

2.1 Modelo Kondo

O magnetismo nos átomos é devido a distribuição eletrônica dos elétrons nos orbitais quânticos s, p, d, f . Se a camada de valência de um átomo é semi-preenchida, a mesma possui um momento magnético resultante. Átomos assim podem constituir o que chamamos aqui de impurezas magnéticas (53). Tomemos como exemplo um átomo de cobalto, cuja configuração é d^7 , e portanto, possui spin total $S = 3/2$. Quando este átomo é depositado numa superfície metálica de cobre, cujos elétrons de condução são do tipo s , os orbitais d do cobalto se hibridizam com os orbitais s dos elétrons do cobre, resultando assim, em última instância, num acoplamento antiferromagnético entre os spins do cobalto e os spins dos elétrons de condução. Um modelo similar ao proposto por Kondo para descrever esse sistema pode ser escrito de maneira bem simples como,

$$H_K = J \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \left[S^z \left(c_{\mathbf{k},\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}',\uparrow} - c_{\mathbf{k},\downarrow}^\dagger c_{\mathbf{k}',\downarrow} \right) + S^+ c_{\mathbf{k},\downarrow}^\dagger c_{\mathbf{k}',\uparrow} + S^- c_{\mathbf{k},\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}',\downarrow} \right], \quad (2.1)$$

onde aqui os operadores S atuam sobre a impureza enquanto que $c_{\mathbf{k}s}^\dagger$ ($c_{\mathbf{k}s}$) cria (aniquila) elétrons com momento \mathbf{k} e spin s na banda de condução.

2.2 Modelo de Anderson

Embora o modelo de Kondo seja capaz de descrever muitos sistemas de impurezas magnéticas, algumas impurezas apresentam também graus de liberdade de carga. Esse é o caso, por exemplo de estruturas moleculares reais ou artificiais construídas com pontos quânticos, em que elétrons podem entrar e sair da impureza. Nesse caso o modelo de Kondo fracassa e precisamos de um modelo mais

completo, e portanto mais fundamental. Perceba que para que ocorra o efeito Kondo, assumimos que o nível da impureza está abaixo do nível de Fermi que é $\varepsilon_d < \varepsilon_F$, e o estado de dupla ocupação se encontrar acima do nível de Fermi $\varepsilon_F < \varepsilon_d + U$ e que a repulsão coulombiana seja alta o suficiente para inibir a dupla ocupação como esquematizado na Figura 2, de maneira que o processo de spin-flip seja intermediado por estados virtuais, caracterizando o origem puramente quântica do efeito Kondo.

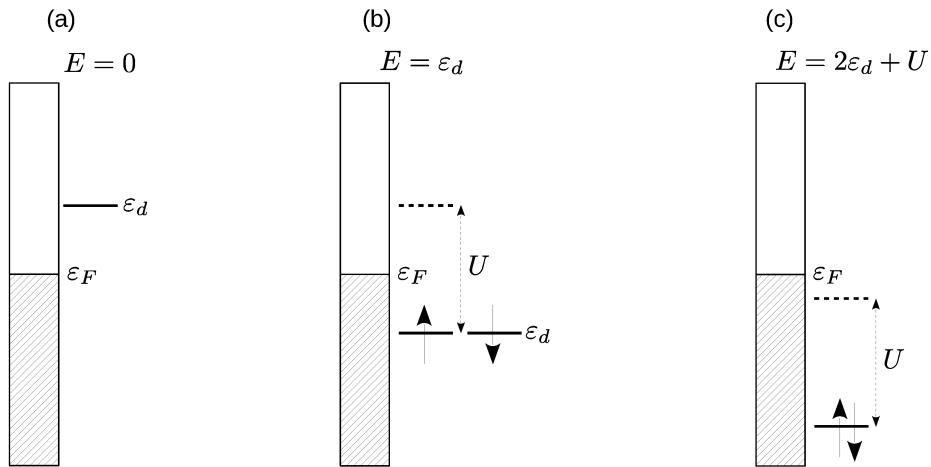


Figura 2: Aqui temos as três configurações possíveis dos níveis de energia da impureza. Podemos observar que a configuração (a), possui ocupação nula, que corresponde ao número de ocupação do nível da impureza, $n_d = 0$ e a energia correspondente $\varepsilon_d = 0$. Na configuração (b), podemos observar que um nível da impureza ocupado por um único elétron que pode ter um índice de spin $\sigma = \uparrow, \downarrow$, ou seja, número de ocupação simples com o operador número $n_d = 1$ e sua energia $\varepsilon_{d,\sigma} = \varepsilon_d$. É nesses estados de ocupação simples que está o grande interesse quando visamos o regime Kondo, pois com elétron *spin-up* ou *spin-down* conduzirem a um momento magnético localizado que é central para o fenômeno Kondo. A última configuração representada por (c), é a de ocupação dupla com energia $\varepsilon_2 = 2\varepsilon_d + U$. Devido ao princípio de exclusão de Pauli, o nível de ocupação dupla, $n_d = 2$, necessariamente deve conter elétrons com spins opostos, resultando em um momento magnético nulo. (54)

No entanto, o modelo Kondo ocorre se no limite da energia de hibridização V_{kd} não for forte o suficiente, com isso o nível da impureza sempre será ocupado com um único elétron. A ocupação da impureza ε_d inicialmente é fixa, possuindo um numero N de elétrons. Vale a pena notar que há uma diferença essencial dependendo sobre se N é par ou ímpar. Se o número de elétrons é ímpar, o elétron não está emparelhado. Esse é o caso da impureza possuir o número de ocupação $n_d = 1$. Contudo, para o caso de dupla ocupação existe um custo energético $E + U$ para colocar um segundo elétron no nível. A ocupação dupla é um fator determinante na formação do momento magnético, caso houvesse uma dupla ocupação, o sistema não conseguiria formar um momento magnético devido o estado possuir

elétrons com spins *up* e *down*. Consideramos a impureza tendo momento magnético e spin definidos, porém podemos ter alterações nas suas orientações porque o spin do elétron que tunela do nível da impureza para a banda de condução pode ser diferente do spin do elétron que tunela da banda de condução (BC) para a impureza. Com isso, quando um elétron da impureza é colocado em um estado de energia desocupado no mar de Fermi existe à necessidade de um outro elétron da banda tunelar para a impureza. Neste caso, poderemos ter a possibilidade do spin da impureza estar em direção oposta. Como resultado final houve um spin *flip* ver Figura (3). Quando levamos em conta muitos desses processos no sistema, podemos encontrar um estado conhecido como ressonância Kondo.

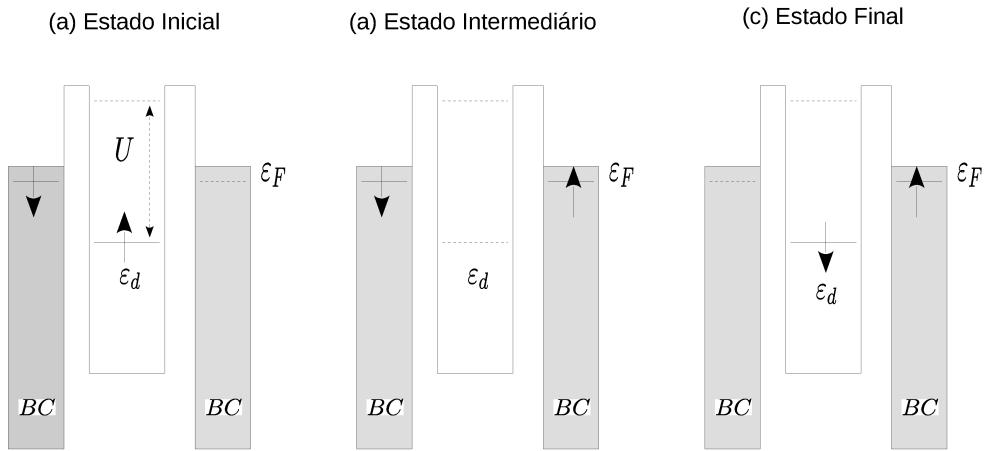


Figura 3: (a) Estado inicial com momento magnético da impureza e o spin do elétron de condução definidos. (b) O estado intermediário é devido ao tunelamento do elétron da impureza para o nível de Fermi. (c) No estado final o elétron da banda de condução tunela para o nível da impureza com spin diferente. Esses são processos de *spin-flip*.

Para descrever esses processos, o modelo de Anderson contém termos que descrevem a energia cinética dos elétrons de condução, a energia da impureza magnética e a interação coulombiana entre os elétrons da impureza. Para uma impureza simples de spin $S = 1/2$, o Hamiltoniano de Anderson pode ser escrito sob a forma (54),

$$H_A = \sum_{\mathbf{k}} \varepsilon_{\mathbf{k}s} c_{\mathbf{k}s}^\dagger c_{\mathbf{k}s} + \sum_s \varepsilon_d d_s^\dagger d_s + U n_{d,\uparrow} n_{d,\downarrow} + \sum_{\mathbf{k}s} (V_{\mathbf{k}}^* c_{\mathbf{k}s}^\dagger d_s + V_{\mathbf{k}} d_s^\dagger c_{\mathbf{k}s}), \quad (2.2)$$

onde $d_s^\dagger(d_s)$ é o operador que cria (aniquila) um elétron com spin $s = \uparrow, \downarrow$ no orbital “*d*” (Embora denotamos por *d* orbital localizado da impureza, não necessariamente trata-se do orbital atômico *d* com suas simetrias) da impureza com energia ε_d , $c_{\mathbf{k}s}^\dagger(c_{\mathbf{k}s})$ cria (aniquila) um elétron com energia $\varepsilon_{\mathbf{k}s}$ e spin s na banda de condução, $U n_{d,\uparrow} n_{d,\downarrow}$ denota a repulsão coulombiana entre elétrons na impureza

e finalmente, $V_{\mathbf{k}}$ denota o tunelamento eletrônico da impureza para a banda de condução.

O termo que descreve elétrons da banda de condução do hospedeiro metálico é dado por,

$$H_s = \sum_{\mathbf{k}} \varepsilon_{\mathbf{ks}} c_{\mathbf{ks}}^\dagger c_{\mathbf{ks}}, \quad (2.3)$$

que corresponde à energia cinética dos elétrons de condução. Por simplicidade consideramos a impureza composta de apenas um único átomo, descrita pelo termo,

$$H_d = \sum_s \varepsilon_d d_s^\dagger d_s + U n_{d,\uparrow} n_{d,\downarrow}, \quad (2.4)$$

aqui ε_d é a energia dos elétrons da camada d . O termo U descreve a interação elétron-elétron ou a interação coulombiana,

$$U = \int \phi_d^*(\mathbf{r}) \phi_d^*(\mathbf{r}') \frac{e^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \phi_d(\mathbf{r}) \phi_d(\mathbf{r}'). \quad (2.5)$$

Por último temos o termo introduzido por Anderson correspondente a hibridização da função de onda dos elétrons deslocalizados e a impureza localizada,

$$H_{s-d} = \sum_{\mathbf{ks}} (V_{\mathbf{k}}^* c_{\mathbf{ks}}^\dagger d_s + V_{\mathbf{k}} d_s^\dagger c_{\mathbf{ks}}). \quad (2.6)$$

Esse modelo não somente é capaz de descrever a flutuação de carga na impureza, mas também reduz-se ao modelo de Kondo no ponto de simetria partícula buraco ($E_d = -U/2$) e no regime em que $U \gg \varepsilon_d \gg \Delta$ onde $\Delta = \pi V^2/D$. Aqui introduzimos o parâmetro D , largura da banda de condução, que introduz uma energia de corte natural do sistema.

Em suma, quando o sistema encontra-se no limite $\varepsilon_d < \varepsilon_F < \varepsilon_d + U$, a impureza pode suportar uma formação de momento magnético diferente de zero. Isso nos garante que o estado quântico da impureza se encontra em um estado com número de ocupação $n_d = 1$. No entanto, não estamos interessado no regime onde há flutuação de carga, em que tal fenômeno é melhor descrito pelo modelo de Anderson. Queremos estudar apenas o regime em que há flutuações de spins, o qual é descrito o modelo Kondo. De fato, podemos demonstrar que o modelo Kondo que descreve flutuações de spins é um caso particular do modelo de Anderson para o caso do termo de hibridização $V_{\mathbf{k}d} \neq 0$ e para baixas ordens. Isso é feito de duas maneiras diferentes, a saber: a dedução do modelo de Kondo a partir do modelo de Anderson pode ser conduzida efetuando uma transformação de Schrieffer-Wolf Ref. (52) ou utilizando a técnica de operador de projeção. Nesse trabalho vamos aplicar a técnica de operador de projeção que será descrita no próximo capítulo.

2.3 O Hamiltoniano spin-órbita em duas dimensões

Estudos sobre impurezas magnéticas acopladas aos elétrons da banda de condução utilizando o modelo de Anderson de impurezas magnéticas tem sido bastante reportados. Além disso, foram conduzidas pesquisas com o modelo de Anderson na presença de interação spin-órbita, mais precisamente do tipo Rashba. Motivados por esses estudos buscamos compreender como um sistema de impurezas descrito pelo modelo de Anderson se comporta na presença da interação do tipo Rashba e Dresselhaus. O Hamiltoniano de Anderson é um dos modelos mais bem compreendidos na física da matéria condensada. Esse modelo descreve a formação de um momento local quando $\varepsilon_d < \varepsilon_F < \varepsilon_d + U$. Com base no que foi discutido anteriormente necessitamos derivar um modelo efetivo a baixas energias utilizando o modelo de Anderson juntamente com interação spin-órbita para descrevermos flutuações de spin. Aqui vamos usar o Hamiltoniano spin-órbita Eq(1.3),

$$\mathcal{H}_{RD}(k) = \sum_k \alpha(k_y\sigma_x - k_x\sigma_y) + \beta(k_x\sigma_x - k_y\sigma_y). \quad (2.7)$$

Note que esse Hamiltoniano não está na base *up* e *down*. Para escrevê-lo nessa representação vamos utilizar as matrizes de Pauli escritas na base *up* e *down*

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (2.8)$$

Agora vamos expressar o Hamiltoniano interação spin-órbita na base *up* e *down*. Para isso utilizamos a representação de spinor,

$$H_{so} = \sum_{\vec{k}} \psi_{\vec{k}}^\dagger \mathcal{H}_{RD}(k) \psi_{\vec{k}}, \quad (2.9)$$

aqui $\psi_{\vec{k}}^\dagger = (c_{\vec{k},\uparrow}^\dagger, c_{\vec{k},\downarrow}^\dagger)$. Depois de operar com as matrizes de Pauli sobre os spinores temos,

$$H_{so} = \sum_{\vec{k}} k(\alpha e^{-i\theta_k} + i\beta e^{i\theta_k}) c_{\vec{k},\uparrow}^\dagger c_{\vec{k},\downarrow} + h.c, \quad (2.10)$$

com θ_k definido por $k_x = k \cos \theta_k$, $k_y = k \sin \theta_k$ e $k = |\vec{k}|$. Esse é o Hamiltoniano sobre o qual será feita a transformação para a base do momento angular.

Na presença da interação spin-órbita é conveniente, em geral, introduzir a base do momento angular para os elétrons de condução. Agora, expressando os operadores de criação e aniquilação do

hamiltoniano H_{so} na base do momento angular,

$$c_{\vec{k},s} = \sqrt{\frac{2\pi}{k}} \sum_m e^{im\theta_k} c_{k,m,s}, \quad (2.11)$$

onde s são os índices de spin e m é o número quântico do orbital magnético da impureza que acopla a banda de condução do elétron. Vamos agora transformar a soma em integral usando a prescrição,

$$\sum_k \rightarrow \frac{N}{(2\pi)^2} \int kdkd\theta, \quad (2.12)$$

e substituir de volta na Eq. (2.11). Feito isso temos,

$$\begin{aligned} H_{so} &= \frac{2\pi}{(2\pi)^2} \int_0^\infty kdk \int_0^{2\pi} d\theta_k \frac{k}{k} (\alpha e^{-i\theta_k} + i\beta e^{i\theta_k}) \sum_{m,m'} e^{i(-m+m')\theta_k} c_{k,m,\uparrow}^\dagger c_{k,m',\downarrow} + H.c \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_0^\infty kdk \sum_{m,m'} \left[\alpha \int_0^{2\pi} d\theta_k e^{i(-m+m'-1)\theta_k} c_{k,m,\uparrow}^\dagger c_{k,m',\downarrow} \right. \\ &\quad \left. + i\beta \int_0^{2\pi} d\theta_k e^{i(-m+m'+1)\theta_k} c_{k,m,\uparrow}^\dagger c_{k,m',\downarrow} + H.c \right] \\ &= \frac{1}{2\pi} \sum_m \int_0^\infty kdk \sum_{m'} 2\pi [\alpha \delta(-m+m'-1) c_{k,m,\uparrow}^\dagger c_{k,m',\downarrow} \\ &\quad + i\beta \delta(-m+m'+1) c_{k,m,\uparrow}^\dagger c_{k,m',\downarrow}] + H.c \\ &= \frac{1}{2\pi} \sum_m \int_0^\infty kdk \sum_{m'} [2\pi\alpha\delta(-m+m'-1) + 2\pi\beta\delta(-m+m'+1)] c_{k,m,\uparrow}^\dagger c_{k,m',\downarrow} + H.c. \end{aligned} \quad (2.13)$$

Nas passagens acima foi usado a definição delta de Kronecker. E nesse caso a expressão será não nula apenas quando, $-m+m'-1=0 \Rightarrow m'=m+1$ no primeiro termo entre colchetes na última linha e $-m+m'+1=0 \Rightarrow m'=m-1$ no segundo, de sorte que o Hamiltoniano fica da seguinte forma,

$$H_{so} = \sum_m \int_0^\infty kdk [\alpha c_{k,m,\uparrow}^\dagger c_{k,m+1,\downarrow} + i\beta c_{k,m,\uparrow}^\dagger c_{k,m-1,\downarrow}] + H.c. \quad (2.14)$$

Perceba que o Hamiltoniano não é diagonal nessa base. Entretanto, podemos escrever o Hamiltoniano spin-órbita do tipo Rashba e Dresselhaus na base que diagonaliza Rashba com momento angular total $J = m + S_z$ por uma transformação canônica da forma

$$c_{k,h,m+\frac{1}{2}} = \frac{1}{\sqrt{2}} (c_{k,m,\uparrow} + hc_{k,m+1,\downarrow}), \quad (2.15)$$

onde $h = \pm 1$ define a helicidade e $j = m + \frac{h}{2}$ é o número quântico do momento angular total. Podemos

inverter as relações entre os operadores na Eq. (2.15), após o que podemos escrever

$$\begin{aligned} c_{k,m,\uparrow} &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(c_{k,+m+\frac{1}{2}} + c_{k,-m+\frac{1}{2}} \right) \\ c_{k,m+1,\downarrow} &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(c_{k,+m+\frac{1}{2}} - c_{k,-m+\frac{1}{2}} \right) \\ c_{k,m-1,\downarrow} &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(c_{k,+m-\frac{3}{2}} - c_{k,-m-\frac{3}{2}} \right). \end{aligned} \quad (2.16)$$

Em termos desses novos operadores o Hamiltoniano (2.14) toma a forma

$$H_{so} = \alpha \sum_{m,h} \int_0^\infty kdkh c_{k,h,m+\frac{1}{2}}^\dagger c_{k,h,m+\frac{1}{2}} + \left[\frac{i\beta}{2} \sum_{m,h,h'} \int_0^\infty kdkh' c_{k,h,m+\frac{1}{2}}^\dagger c_{k,h',m-\frac{3}{2}} + H.c. \right]. \quad (2.17)$$

Nota-se que o Hamiltoniano Rashba é diagonalizado na base com momento angular total, mas, o Hamiltoniano Dresselhaus não o é. Isto resulta do fato de que a presença dos dois tipos de interação spin-órbita quebra a simetria de rotação no plano xy e, consequentemente, o momento angular total não pode ser um bom número quântico. Juntando todos os termos podemos escrever o Hamiltoniano de Anderson em 2D como,

$$\begin{aligned} H_A = & \sum_{h,m} \int_0^\infty dk \varepsilon_{k,h} c_{k,h,m+\frac{1}{2}}^\dagger c_{k,h,m+\frac{1}{2}} + \varepsilon_d (n_\uparrow + n_\downarrow) + U(n_\uparrow n_\downarrow) \\ & + \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \sum_{h,m=0} \int_0^\infty dk \sqrt{k} V_k \left[c_{k,h,0+\frac{1}{2}}^\dagger d_\uparrow + h c_{k,h,0-\frac{1}{2}}^\dagger d_\downarrow + H.c. \right] + \left[\frac{i\beta}{2} \sum_{m,h'} \int_0^\infty kdkh' c_{k,h,m+\frac{1}{2}}^\dagger c_{k,h',m-\frac{3}{2}} + H.c. \right]. \end{aligned} \quad (2.18)$$

Perceba que o termo proporcional a α , no hamiltoniano H_{so} , foi anexado junto com o termo da banda de condução, $\varepsilon_{k,h} = \varepsilon_k + \alpha kh$. Note que o último termo (proporcional a β) acopla elétrons com diferentes momentos angulares. Isto reflete o fato que o momento angular total não é uma quantidade conservada na presença de ambos os acoplamentos spin-órbita, o que representa uma dificuldade na obtenção do Hamiltoniano efetivo. Por esta razão, a influência da interação spin-órbita Rashba no efeito Kondo encontra-se relativamente bem estudado em sistemas bidimensionais, mas não se investigou o efeito de ambas as interações. Aqui também não vamos adentrar no problema bidimensional. Como o nosso foco é em sistemas unidimensionais vamos reduzir a dimensionalidade do sistema para 1D. Como já mencionamos, em uma dimensão, não somente a abordagem teórica fica facilitada como também é de grande interesse no contexto da física atual. Além disso, até onde sabemos, o efeito Kondo não foi estudado em sistemas unidimensionais com interação spin-órbita do tipo Rashba e Dresselhaus.

2.4 O Hamiltoniano spin-órbita em uma dimensão

O efeito da interação spin órbita em sistemas 1D possui grande relevância na física atual. Por exemplo, no contexto de fios quânticos InSb (55) e isolantes topológicos (56). Esse tipo de sistema está representado na Figura 4. Na realidade, o efeito da interação spin-órbita no regime Kondo pode ser mais importante no caso unidimensional. Em temperatura muito baixa, espalhamentos que conservam energia tornam-se mais relevantes em comparação com os espalhamentos que não conservam energia. Contrastando com o caso 2D, em que espalhamentos podem ocorrer em variadas direções e que conservam energia são também permitidos, em sistemas 1D somente espalhamentos *backward* ou *forward* são permitidos. Em situações em que espalhamentos *backward* requer *spin-flip*, espera-se que o papel da interação spin-órbita tenha muito mais influência no efeito Kondo em sistemas 1D comparado com sistemas 2D.

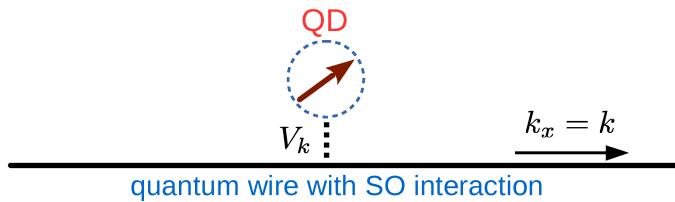


Figura 4: Representação de um ponto quântico acoplado a um nanofio com interação spin-órbita. Assumimos o fio na direção x. V_K representa o *hopping* dos elétrons do ponto quântico para o fio.

Portanto, vamos utilizar o modelo de Anderson com interação spin-órbita para descrever uma impureza magnética interagindo com elétrons de condução em um hospedeiro metálico 1D. O Hamiltoniano de Anderson na base *spin up* e *spin down* é dado da seguinte forma,

$$\begin{aligned} H_A &= \sum_k \varepsilon_k (c_{k,\uparrow}^\dagger c_{k,\uparrow} + c_{k,\downarrow}^\dagger c_{k,\downarrow}) + \varepsilon_d (d_\uparrow^\dagger d_\uparrow + d_\downarrow^\dagger d_\downarrow) + U n_{d,\uparrow} n_{d,\downarrow} \\ &\quad + \sum_k [V_k^* (c_{k,\uparrow}^\dagger d_\uparrow + c_{k,\downarrow}^\dagger d_\downarrow) + V_k (d_\downarrow^\dagger c_{k,\downarrow} + d_\uparrow^\dagger c_{k,\uparrow})]. \end{aligned} \quad (2.19)$$

Vamos agora incluir a interação spin-órbita em uma dimensão. Usando o Hamiltoniano spin-órbita, Eq. (1.3) e escolhendo o momento $k_y = 0$ teremos

$$\mathcal{H}_{RD} = k_x (\beta \sigma_x - \alpha \sigma_y). \quad (2.20)$$

Quando tratamos o modelo de Anderson em duas dimensões, foi usado uma combinação que diagonaliza o Hamiltoniano Rashba somente. Desta forma, Dresselhaus não ficou na forma diag-

nal. Em uma dimensão, podemos encontrar uma transformação que diagonaliza todo o Hamiltoniano (Rashba e Dresselhaus). Na forma matricial, na base de S^z , o Hamiltoniano (2.20) toma a forma

$$\mathcal{H}_{RD} = \begin{pmatrix} \varepsilon_k & k_x(\beta + i\alpha) \\ k_x(\beta - i\alpha) & \varepsilon_k \end{pmatrix}, \quad (2.21)$$

de onde encontramos o autovalor $E_{\pm} = \varepsilon_k \pm \sqrt{k_x^2(\alpha^2 + \beta^2)}$. A matriz \mathcal{U} com os autovetores que diagonaliza o Hamiltoniano pode ser escrita da seguinte forma,

$$\mathcal{U} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{\alpha - i\beta}{\sqrt{2(\alpha^2 + \beta^2)}} \\ \frac{(\beta - i\alpha)}{\sqrt{2(\alpha^2 + \beta^2)}} & \frac{i}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & e^{-i\theta} \\ -ie^{i\theta} & i \end{pmatrix}. \quad (2.22)$$

Essa matriz claramente obedece a condição de unitariedade

$$\mathcal{U}^\dagger \mathcal{U} = 1. \quad (2.23)$$

Agora podemos aplicar a matriz (2.22) no hamiltoniano spin-órbita (2.20),

$$\mathcal{H}_{so} = \mathcal{U}^\dagger \mathcal{H}_{RD} \mathcal{U} = k_x \sqrt{\alpha^2 + \beta^2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = k_x \sqrt{\alpha^2 + \beta^2} \sigma_z. \quad (2.24)$$

Note que σ_z é a base transformada para o espaço da helicidade e que essa base, após a diagonalização do Hamiltoniano (2.21), corresponde $\frac{1}{\sqrt{2}} (\sigma_x - \sigma_y)$ na base original de spin *up* e *down*.

Voltando ao Hamiltoniano spin-órbita (2.24), vamos escrevê-lo em termos dos operadores de criação e aniquilação sob a forma

$$H_{so} = \sum_k \psi_k^\dagger \mathcal{H}_{so} \psi_k, \quad (2.25)$$

onde $\psi_k^\dagger = (c_{k,+}^\dagger, c_{k,-}^\dagger)$.

Frente à matriz de transformação \mathcal{U} , os operadores de criação e aniquilação se transformam como

$$\begin{pmatrix} c_{k\uparrow} \\ c_{k\downarrow} \end{pmatrix} = \mathcal{U} \begin{pmatrix} c_{k+} \\ c_{k-} \end{pmatrix} = \frac{i}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} c_{k+} + e^{-i\theta} c_{k-} \\ -e^{i\theta} c_{k+} - c_{k-} \end{pmatrix}. \quad (2.26)$$

que corresponde a uma rotação no espaço de spin, e é independente do momento. Com isso temos,

$$\tilde{\mathcal{H}}_{so} = |\gamma| k (c_{k,+}^\dagger c_{k,+} - c_{k,-}^\dagger c_{k,-}), \quad (2.27)$$

onde $|\gamma| = \sqrt{\alpha^2 + \beta^2}$.

Note que o Hamiltoniano de Anderson (2.19) não está na base de helicidade. Para que o Hamiltoniano (2.19) fique nessa base, vamos girar os operadores da impureza no espaço de spin da mesma forma que fizemos na Eq. (2.26) para diagonalizar o Hamiltoniano spin-órbita, Eq. (2.20),

$$\begin{pmatrix} d_{\uparrow} \\ d_{\downarrow} \end{pmatrix} = \mathcal{U} \begin{pmatrix} d_+ \\ d_- \end{pmatrix} = \frac{i}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} d_+ + e^{-i\theta} d_- \\ -e^{i\theta} d_+ - d_- \end{pmatrix}. \quad (2.28)$$

É fácil verificar que o Hamiltoniano de Anderson fica invariante com essa transformação. Assim o Hamiltoniano total 1D na base de helicidade toma a seguinte forma,

$$H_A = \sum_{k,h} \varepsilon_{k,h} c_{k,h}^\dagger c_{k,h} + \sum_h \varepsilon_d d_h^\dagger d_h + U n_{d,+} n_{d,-} + \sum_{k,h} (V_k^* c_{k,h}^\dagger d_h + V_k d_h^\dagger c_{k,h}). \quad (2.29)$$

Aqui $\varepsilon_{k,h} = \varepsilon_k + h|\gamma|k$ e $|\gamma| = \sqrt{\alpha^2 + \beta^2}$. Onde α e β são as constantes spin-órbita Rashba e Dresselhaus respectivamente.

Sumarizando, o efeito de incluir interação spin-órbita no sistema deixou o Hamiltoniano de Anderson, Eq. 2.29, na base de helicidade invariante. Os termos da energia da impureza ε_d e da energia de hibridização V_k não sofreram alterações devido a inclusão da interação spin órbita. No entanto, o termo que representa os elétrons itinerantes ε_k sofreu um *shift* na banda de condução, antes as bandas que representava, *spin-up* e *spin-down*, tinham degenerescência de spin o que já não ocorre na presença da interação spin-órbita (SO). Portanto, uma consequência da presença da interação spin-órbita, Rashba e Dresselhaus, é uma quebra de degenerescência de spin na banda de condução, veja Figura (5). Essa quebra de degenerescência é evidenciada no cálculo do autovalor $\varepsilon_{k,h} = \varepsilon_k + h|\gamma|k$

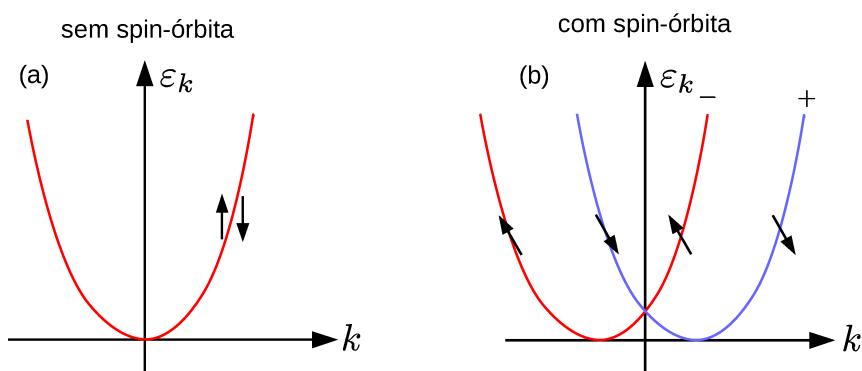


Figura 5: Ilustração interação spin-órbita tipo Rashba. (a) Banda de condução dos elétrons livres com degenerescência de spin dupla na ausência de interação spin-órbita. (b) Na presença do acoplamento spin-órbita tipo Rashba, os elétrons de condução sentem um campo magnético efetivo. Portanto, existe uma quebra de degenerescência de spin na banda de condução.

e $|\gamma| = \sqrt{\alpha^2 + \beta^2}$ do Hamiltoniano spin-órbita. A Figura (5) ilustra um sistema sem interação spin-órbita, banda de condução de elétrons livres e com degenerescência dupla de spins e um sistema com interação spin-órbita onde a degenerescência dupla foi quebrada devida a essa interação. Note que no ponto em $k = 0$ a degenerescência não é quebrada, pois a interação spin-órbita requer que o momento seja não nulo. Nesse ponto o acoplamento spin-órbita desaparece e cria um cruzamento entre as duas bandas (57).

3 *Modelo efetivo*

Como foi mencionado acima, procuramos um Hamiltoniano efetivo que descreva o sistema no regime de baixa temperatura que captura os mecanismos associados ao efeito Kondo. Partiremos do Hamiltoniano Anderson (2.29) com a interação spin-órbita. Para derivar um Hamiltoniano tipo Kondo, vamos usar a técnica dos operadores de projeção. Como estamos interessados em um regime onde o momento magnético local é diferente de zero, que é a condição para que o fenômeno Kondo apareça, vamos particionar o espaço de Hilbert em três subespaços. Esses subespaços correspondem aos estados vazio, de um elétron e de dois elétrons, no que diz respeito a impureza. Esses subespaços podem ser representados por suas funções de onda ψ_n correspondente a essas ocupações, ψ_0 , ψ_1 e ψ_2 .

3.1 Projeção do Hamiltoniano

Com base na discussão dos níveis de energia da impureza, vamos deduzir um Hamiltoniano efetivo para o subespaço de um elétron, considerando de altas energias os estados de zero e dois elétrons na impureza. Para projetarmos o Hamiltoniano (2.29) no subespaço de Hilbert de ocupação simples, vamos escrever o Hamiltoniano sob a forma matricial,

$$\begin{pmatrix} H_{00} & H_{01} & H_{02} \\ H_{10} & H_{11} & H_{12} \\ H_{20} & H_{21} & H_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_0 \\ \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \psi_0 \\ \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix}, \quad (3.1)$$

onde $H_{n,n'} = P_n H P_{n'}$, com P_n e $P_{n'}$ sendo os operadores de projeção nos subespaços designados pelos índices n e n' . Em termos do número de ocupação, podemos escrever esses operadores como,

$$P_0 = (1 - n_{d,+})(1 - n_{d,-}), \quad (3.2a)$$

$$P_1 = n_{d,+} + n_{d,-} - 2n_{d,+}n_{d,-}, \quad (3.2b)$$

e

$$P_2 = n_{d,+}n_{d,-}. \quad (3.2c)$$

Os operadores de projeção respeitam as seguintes regras

$$\sum_{n=0,1,2} P_n = 1 \quad (3.3a)$$

e

$$\psi_n = P_n \psi, \quad (3.3b)$$

onde $\psi = \psi_0 + \psi_1 + \psi_2$. Projetando os estados com número de ocupação $n_d = 0$ e $n_d = 2$ do Hamiltoniano 2.29 sobre o subespaço $n_d = 1$. Portanto, obtemos

$$[H_{11} + H_{10}(E - H_{00})^{-1} H_{01} + H_{12}(E - H_{22})^{-1} H_{21}] \psi_1 = E \psi_1. \quad (3.4)$$

Com isso temos condições de ver os efeitos das excitações virtuais no subespaço de ocupação simples e da equação acima identificamos o Hamiltoniano efetivo

$$H = H_{11} + H_{10}(E - H_{00})^{-1} H_{01} + H_{12}(E - H_{22})^{-1} H_{21}, \quad (3.5)$$

que atua no subespaço da função de onda ψ_1 . Note que é necessário calcularmos explicitamente os termos H_{00} , H_{11} , H_{22} , H_{10} , H_{01} , H_{12} e H_{21} . Usando as Eq. (3.2) obtemos

$$\begin{aligned} H_{00} &= \sum_{k,h} \varepsilon_{k,h} c_{k,h}^\dagger c_{k,h} = H_0 + H_{so} \\ H_{11} &= \sum_h (\varepsilon_d + H_0 + H_{so}) n_{d,h} (1 - n_{d,\bar{h}}) \\ H_{10} &= \sum_{k,h} V_k (1 - n_{d,\bar{h}}) d_h^\dagger c_{k,h} \\ H_{01} &= \sum_{k,h} V_k^* (1 - n_{d,\bar{h}}) c_{k,h}^\dagger d_h \\ H_{12} &= \sum_{k,h} V_k^* n_{d,\bar{h}} c_{k,h}^\dagger d_h \\ H_{21} &= \sum_{k,h} V_k n_{d,\bar{h}} d_h^\dagger c_{k,h} \\ H_{22} &= (2\varepsilon_d + U + H_0 + H_{so}) n_{d\uparrow} n_{d\downarrow}. \end{aligned} \quad (3.6)$$

Para derivar o Hamiltoniano tipo Kondo é necessário calcular os dois últimos termos da Eq. (3.5).

Com isso, usando as Eqs. (3.6) podemos escrever

$$H_{10}(E - H_{00})^{-1} H_{01} = \left[\sum_{k,h} V_k (1 - n_{d,\bar{h}}) d_h^\dagger c_{k,h} \right] (E - H_{00})^{-1} \left[\sum_{k',h'} V_{k'}^* (1 - n_{d,\bar{h}'}) c_{k',h'}^\dagger d_{h'} \right]. \quad (3.7)$$

O estado de referência da impureza é o estado com número de ocupação $n_d = 1$, um elétron com *spin-up* ou *spin-down*. Então, o termo H_{01} corresponde fisicamente à aniquilação de um elétron no nível da impureza com helicidade h e criação de um elétron na banda de condução com momento k e helicidade h . Para o termo H_{10} a interpretação análoga, exceto que agora cria-se um elétron com helicidade h e aniquila um elétron na banda de condução com a mesma helicidade e momento k . O termo $(E - H_{00})^{-1}$ representa a projeção do estado de ocupação nula no estado de ocupação simples. Para o último termo da Eq. (3.5) temos

$$H_{12}(E - H_{22})^{-1} H_{21} = \left[\sum_{k',h'} V_{k'} n_{d,\bar{h}'} c_{k',h'}^\dagger d_{h'} \right] (E - H_{22})^{-1} \left[\sum_{k,h} V_k^* n_{d,\bar{h}} d_h^\dagger c_{k,h} \right]. \quad (3.8)$$

Aqui as excitações virtuais, agora correspondem ao estado duplamente ocupado. Então, o termo H_{12} descreve fisicamente a aniquilação de um elétron no nível da impureza com helicidade h e criação de um elétron na banda de condução com momento k e helicidade h . Para o termo H_{21} a interpretação é idêntica, exceto que agora cria-se um elétron com helicidade h e aniquila um elétron na banda de condução com helicidade h , e momento k . O termo $(E - H_{22})^{-1}$ representa a energia das excitações virtuais, nesse caso da projeção do estado de ocupação dupla no estado de ocupação simples.

Note que nas Eqs. (3.7) e (3.8) não podemos mover o operador $c_{k,h}$ livremente para o lado direito porque ele não comuta com os Hamiltonianos dos dois subespaços, ocupação nula e ocupação dupla, H_{00} e H_{22} , respectivamente. Vamos expandir em série de potência os termos $(E - H_{00})^{-1}$ e $(E - H_{22})^{-1}$,

$$\begin{aligned} c_{k,h}(E - H_{00})^{-1} &= c_{k,h} E^{-1} \left(1 - \frac{H_{00}}{E} \right)^{-1} \\ &= \frac{1}{E} \left[1 + \frac{c_{k,h} H_{00}}{E} + c_{k,h} \left(\frac{H_{00}}{E} \right)^2 + c_{k,h} \left(\frac{H_{00}}{E} \right)^3 + \dots \right] \end{aligned} \quad (3.9)$$

e

$$\begin{aligned} (E - H_{22})^{-1} c_{k,h} &= E^{-1} \left(1 - \frac{H_{22}}{E} \right)^{-1} c_{k,h} \\ &= \frac{1}{E} \left[1 + \frac{H_{22} c_{k,h}}{E} + \left(\frac{H_{22}}{E} \right)^2 c_{k,h} + \left(\frac{H_{22}}{E} \right)^3 c_{k,h} + \dots \right]. \end{aligned} \quad (3.10)$$

Agora podemos notar claramente quais termos não comutam nas equações acima. Veja que teremos

que escrever o termo de ordem n para essa expansão da seguinte forma,

$$\sum_n c_{k,h} \left(\frac{H_{00}}{E} \right)^n = c_{k,h} \frac{1}{E} \left(1 - \frac{H_{00}}{E} \right)^{-1}, \quad (3.11)$$

e

$$\sum_n c_{k,h}^\dagger \left(\frac{H_{22}}{E'} \right)^n = c_{k,h}^\dagger \frac{1}{E'} \left(1 - \frac{H_{22}}{E'} \right)^{-1}. \quad (3.12)$$

Combinando as Eqs. (3.9), (3.11) e Eq. (3.12), temos

$$c_{k,h} (E - H_{00})^{-1} = \frac{1}{E} c_{k,h} \left(1 - \frac{H_{00}}{E} \right)^{-1} = \frac{1}{E} c_{k,h} \sum_n \left(\frac{H_{00}}{E} \right)^n \quad (3.13)$$

e

$$(E - H_{22})^{-1} c_{k,h} = \frac{1}{E'} \left(1 - \frac{H_{22}}{E'} \right)^{-1} c_{k,h} = \frac{1}{E'} \sum_n \left(\frac{H_{22}}{E'} \right)^n c_{k,h}. \quad (3.14)$$

Após algumas manipulações algébricas obtemos

$$\begin{aligned} c_{k,h} (E - H_{00})^{-1} &= (E - \varepsilon_{k,h} - H_0 - H_{so})^{-1} c_{k,h} \\ &= (E - \varepsilon_{k,h} - H_0 - H_{so} + \varepsilon_d - \varepsilon_d)^{-1} c_{k,h} \\ &= (\varepsilon_d - \varepsilon_{k,h})^{-1} \left[1 - \frac{E - H_0 - H_{so} - \varepsilon_d}{\varepsilon_d - \varepsilon_{k,h}} \right]^{-1} c_{k,h}, \end{aligned} \quad (3.15)$$

e

$$\begin{aligned} c_{k,h}^\dagger (E - H_{22})^{-1} &= (E - 2\varepsilon_d - U - H_0 + \varepsilon_{k,h} + H_{so})^{-1} c_{k,h}^\dagger \\ &= (E - 2\varepsilon_d - U - H_0 + \varepsilon_{k,h} + H_{so})^{-1} c_{k,h}^\dagger \\ &= (\varepsilon_{k,h} - \varepsilon_d - U)^{-1} \left[1 - \frac{E - H_0 - H_{so} - \varepsilon_d}{\varepsilon_d + U - \varepsilon_{k,h}} \right]^{-1} c_{k,h}^\dagger. \end{aligned} \quad (3.16)$$

Aqui $(\varepsilon_d - \varepsilon_{k,h})$ e $(\varepsilon_{k,h} - \varepsilon_d - U)$ correspondem às energias de excitações dos estados virtuais de ocupação zero e ocupação dupla, respectivamente. Temos estabelecido que o regime para surgimento do momento local a partir do modelo de Anderson é favorável nas seguintes condições: $\varepsilon_d + U \gg \varepsilon_F$ e $\varepsilon_d \ll \varepsilon_F$. Isso que garante que as energias dos estados de dupla ocupação e ocupação zero são energeticamente distantes em relação a de ocupação simples. Temos também a comparação entre as energias desses dois estados $|\varepsilon_d + U - \varepsilon_F|, |\varepsilon_d - \varepsilon_F| \gg \Delta$, sendo Δ o alargamento dos níveis de energia devido à hibridização. Essas condições são necessárias para o surgimento do momento magnético no estado com número de ocupação simples, $n_d = 1$. Como os estados vazio e de dupla ocupação tem

energias energeticamente distantes que o estado $n_d = 1$, podemos aplicar teoria de perturbação em baixas ordens para a energia de hibridização e consequentemente eliminarmos o segundo termo entre colchetes das equações citadas, levando em conta a seguinte aproximação $E - H_0 - \varepsilon_d \ll \varepsilon_d - \varepsilon_{k,h}$. Portanto, podemos desconsiderar o segundo termo entre colchetes, de modo a escrever

$$c_{k,h}(E - H_{00})^{-1} = (\varepsilon_d - \varepsilon_{k,h})^{-1} c_{k,h} \quad (3.17)$$

e

$$c_{k,h}^\dagger(E - H_{22})^{-1} = (\varepsilon_{k,h} - \varepsilon_d - U)^{-1} c_{k,h}^\dagger. \quad (3.18)$$

Veja que nas equações 3.7 e 3.8 podemos escolher anti-comutar tanto o operador $c_{k,h}$ quanto o operador $c_{k',h'}^\dagger$. Ao escolher um deles o Hamiltoniano resultante não fica simétrico. Precisamos utilizar os dois casos. Assim, vamos simetrizar o resultado somando os dois casos e dividindo por 2. Assim obtemos

$$\begin{aligned} H_{10}(E - H_{00})^{-1} H_{01} &= \sum_{\substack{k,k' \\ h,h'}} \frac{V_{k'}^* V_k}{2} \left\{ \frac{1}{\varepsilon_d - \varepsilon_k} \left[1 - \frac{|\gamma|hk}{\varepsilon_d - \varepsilon_k} \right]^{-1} + \frac{1}{\varepsilon_d - \varepsilon_{k'}} \left[1 - \frac{|\gamma|h'k'}{\varepsilon_d - \varepsilon_{k'}} \right]^{-1} \right\} \\ &\times (1 - n_{d,\bar{h}}) d_h^\dagger c_{k,h} (1 - n_{d,\bar{h}'}) c_{k',h'}^\dagger d_{h'}, \end{aligned} \quad (3.19)$$

e

$$\begin{aligned} H_{12}(E - H_{22})^{-1} H_{21} &= \sum_{\substack{k,k' \\ h,h'}} \frac{V_{k'}^* V_k}{2} \left\{ -\frac{1}{\varepsilon_d + U - \varepsilon_k} \left[1 - \frac{|\gamma|hk}{\varepsilon_d + U - \varepsilon_k} \right]^{-1} \right. \\ &\left. - \frac{1}{\varepsilon_d + U - \varepsilon_{k'}} \left[1 - \frac{|\gamma|h'k'}{\varepsilon_d + U - \varepsilon_{k'}} \right]^{-1} \right\} n_{d,\bar{h}'} c_{k',h'}^\dagger d_{h'} n_{d,\bar{h}} d_h^\dagger c_{k,h}. \end{aligned} \quad (3.20)$$

Denotando os termos entre chaves das Eq. (3.19) e (3.20) por

$$a_{k,h} = \frac{1}{\varepsilon_d - \varepsilon_k} \left[1 - \frac{|\gamma|hk}{\varepsilon_d - \varepsilon_k} \right]^{-1} \quad (3.21)$$

e

$$b_{k,h} = -\frac{1}{\varepsilon_d + U - \varepsilon_k} \left[1 - \frac{|\gamma|hk}{\varepsilon_d + U - \varepsilon_k} \right]^{-1} \quad (3.22)$$

podemos escrever as Eqs. (3.19) e (3.20) de forma mais amigável

$$H_{10}(E - H_{00})^{-1} H_{01} = \sum_{\substack{k,k' \\ h,h'}} V_{k'}^* V_k \left(\frac{a_{k,h} + a_{k',h'}}{2} \right) (1 - n_{d,\bar{h}}) d_h^\dagger c_{k,h} (1 - n_{d,\bar{h}'}) c_{k',h'}^\dagger d_{h'} \quad (3.23)$$

$$H_{12}(E - H_{22})^{-1} H_{21} = \sum_{\substack{k,k' \\ h,h'}} V_{k'}^* V_k \left(\frac{b_{k,h} + b_{k',h'}}{2} \right) n_{d,\bar{h}'} c_{k',h'}^\dagger d_{h'} n_{d,\bar{h}} d_h^\dagger c_{k,h}. \quad (3.24)$$

O termo primeiro entre parênteses na (3.23) é o termo que descreve o acoplamento entre os elétrons da banda de condução e os spins da impureza magnética. Vamos agora expandir cada termo das Eqs. (3.21) e (3.22) em série de Taylor (para todas as ordens), escrevendo-os como

$$a_{k,h} = \frac{1}{\varepsilon_d - \varepsilon_k} \left[1 - \frac{|\gamma|hk}{\varepsilon_d - \varepsilon_k} \right]^{-1} = \frac{1}{\varepsilon_d - \varepsilon_k} \sum_{j=0}^{\infty} h^j \left(\frac{|\gamma|k}{\varepsilon_d - \varepsilon_k} \right)^j \quad (3.25)$$

e

$$b_{k,h} = -\frac{1}{\varepsilon_d + U - \varepsilon_k} \left[1 - \frac{|\gamma|hk}{\varepsilon_d + U - \varepsilon_k} \right]^{-1} = -\frac{1}{\varepsilon_d + U - \varepsilon_k} \sum_{j=0}^{\infty} h^j \left(\frac{|\gamma|k}{\varepsilon_d + U - \varepsilon_k} \right)^j.$$

Lembremos agora que, como $h = \pm 1$, então, $h^j = 1$ para j par e $h^j = h$ para j ímpar. De sorte que podemos dividir as somas acima em temos pares e ímpares em j . Assim podemos escrever,

$$a_{k,h} = G^{(e)}(\varepsilon_d, \varepsilon_k) + hG^{(o)}(\varepsilon_d, \varepsilon_k). \quad (3.26)$$

e

$$b_{k,h} = -[G^{(e)}(\varepsilon_d + U, \varepsilon_k) + hG^{(o)}(\varepsilon_d + U, \varepsilon_k)], \quad (3.27)$$

onde definimos

$$G^{(e)}(\varepsilon_d, \varepsilon_k) = \frac{1}{\varepsilon_d - \varepsilon_k} \sum_{j=0}^{\infty} \left(\frac{|\gamma|k}{\varepsilon_d - \varepsilon_k} \right)^{2j} = \frac{(\varepsilon_d - \varepsilon_k)}{(\varepsilon_d - \varepsilon_k)^2 - |\gamma|^2 k^2} \quad (3.28)$$

e

$$G^{(o)}(\varepsilon_d, \varepsilon_k) = \frac{1}{\varepsilon_d - \varepsilon_k} \sum_{j=0}^{\infty} \left(\frac{|\gamma|k}{\varepsilon_d - \varepsilon_k} \right)^{2j+1} = \frac{|\gamma|k}{(\varepsilon_d - \varepsilon_k)^2 - |\gamma|^2 k^2}. \quad (3.29)$$

É importante notar que a série converge somente para $|\gamma|k < (\varepsilon_d - \varepsilon_k)$. Isto impõe naturalmente o regime de validade da expansão, $|\gamma|k_F < (\varepsilon_d - \varepsilon_{k_F})$ e $|\gamma|k_F < (\varepsilon_d + U - \varepsilon_{k_F})$.

Note nas Eqs. (3.26) e (3.27) que $a_{k,h}$ e $b_{k,h}$ tem a mesma forma. Portanto, definindo uma nova função $G(\varepsilon_d, \varepsilon_k) = G^{(e)}(\varepsilon_d, \varepsilon_k) + hG^{(o)}(\varepsilon_d, \varepsilon_k)$, podemos escrever

$$a_{k,h} = G_h(\varepsilon_d, \varepsilon_k) \quad (3.30)$$

e

$$b_{k,h} = -G_h(\varepsilon_d + U, \varepsilon_k). \quad (3.31)$$

Essas novas definições permite-nos reescrever o Hamiltoniano efetivo (3.5) de uma forma mais compacta como

$$\begin{aligned} H = & H_0 + \sum_{\substack{k,k' \\ h,h'}} \frac{V_{k'}^* V_k}{2} \left\{ [G_h(\varepsilon_d, \varepsilon_k) + G_{h'}(\varepsilon_d, \varepsilon_{k'})] (1 - n_{d,\bar{h}}) d_h^\dagger c_{k,h} (1 - n_{d,\bar{h}'}) c_{k',h'}^\dagger d_{h'} \right. \\ & \left. - [G_h(\varepsilon_d, \varepsilon_k, U) + G_{h'}(\varepsilon_d, \varepsilon_{k'}, U)] n_{d,\bar{h}'} c_{k',h'}^\dagger d_{h'} n_{d,\bar{h}} d_h^\dagger c_{k,h} \right\}. \end{aligned} \quad (3.32)$$

Afim de extrair a física contida no Hamiltoniano (3.32) precisamos efetuar a soma sobre h e h' . Esse processo é trabalhoso e extenso, e por isso vamos omitir os detalhes aqui. Como resultado, após um arranjo cuidadoso dos diversos termos, obtemos

$$\begin{aligned} H = & \sum_{k,k'} J_{k,k'} \left[S_\pm^z (c_{k',+}^\dagger c_{k,+} - c_{k',-}^\dagger c_{k,-}) + S_\pm^- c_{k',+}^\dagger c_{k,-} + S_\pm^+ c_{k',-}^\dagger c_{k,+} \right] \\ & + \sum_{k,k'} \Gamma_{k,k'} (c_{k',-}^\dagger c_{k,+} d_+^\dagger d_- - c_{k',+}^\dagger c_{k,-} d_-^\dagger d_+) + \sum_{k,k'} [\Gamma_{k,k'}^{(1)} S_\pm^z (c_{k',+}^\dagger c_{k,+} + c_{k',-}^\dagger c_{k,-})] \\ & + \sum_{k,k'} \left[\frac{\Gamma_{k,k'}^{(2)}}{2} (n_{d,+} + n_{d,-}) (c_{k',+}^\dagger c_{k,+} - c_{k',-}^\dagger c_{k,-}) \right]. \end{aligned} \quad (3.33)$$

Na equação acima os operadores de spin da impureza S^-, S^+, S^z e n_d , estão escritos na base de helicidade $h = \pm$. Na dedução do modelo efetivo tipo Kondo, surge um termo que não possui dependência do spin da impureza, esse termo é denominado potencial espalhador. Como não possui interação dos elétrons da banda de condução com o spin da impureza esse termo não contribuirá para processos de espalhamento no modelo Kondo.

O primeiro termo da Eq. (3.33) corresponde ao convencional Hamiltoniano Kondo,

$$H_K = \sum_{k,k'} J_{k,k'} \left[S_\pm^z (c_{k',+}^\dagger c_{k,+} - c_{k',-}^\dagger c_{k,-}) + S_\pm^- c_{k',+}^\dagger c_{k,-} + S_\pm^+ c_{k',-}^\dagger c_{k,+} \right], \quad (3.34)$$

com o acoplamento Kondo,

$$J_{k,k'} = V_k V_{k'}^* \frac{A_k + A_{k'}}{2}, \quad (3.35)$$

onde,

$$A_k = -G^{(e)}(\varepsilon_d, \varepsilon_k) + G^{(e)}(\varepsilon_d, U, \varepsilon_k) = \frac{(\varepsilon_k - \varepsilon_d)}{(\varepsilon_d - \varepsilon_k)^2 - |\gamma|^2 k^2} + \frac{(\varepsilon_d + U - \varepsilon_k)}{(\varepsilon_d + U - \varepsilon_k)^2 - |\gamma|^2 k^2}. \quad (3.36)$$

Observe que $J_{k,k'}$ depende do acoplamento spin-órbita. Por inspeção podemos ver que na ausência da interação SO ($\gamma = 0$) recuperamos o acoplamento Kondo convencional, no qual $A_k = (\varepsilon_d + U - \varepsilon_k)^{-1} + (\varepsilon_d - \varepsilon_k)^{-1}$.

O segundo termo da Eq. (3.33) Dzaloshinskii-Moryia pode ser escrito como

$$H_{DM} = \sum_{k,k'} \Gamma_{k,k'} \left(c_{k',-}^\dagger c_{k,+} + d_+^\dagger d_- - c_{k',+}^\dagger c_{k,-} - d_-^\dagger d_+ \right). \quad (3.37)$$

Aqui o acoplamento $\Gamma_{k,k'}$ é dado por

$$\Gamma_{k,k'} = V_k V_{k'}^* \frac{B_k^{(+)} - B_{k'}^{(+)}}{2}, \quad (3.38)$$

sendo,

$$B_k^{(\pm)} = \pm G^o(\varepsilon_d, \varepsilon_k) - G^o(\varepsilon_d, U, \varepsilon_k) = \pm |\gamma| k \left[\frac{1}{(\varepsilon_d - \varepsilon_k)^2 - |\gamma|^2 k^2} \mp \frac{1}{(\varepsilon_d + U - \varepsilon_k)^2 - |\gamma|^2 k^2} \right]. \quad (3.39)$$

Finalmente, o terceiro termo tem a seguinte forma

$$H_{EY} = \sum_{k,k'} \left[\Gamma_{k,k'}^{(1)} S_\pm^z (c_{k',+}^\dagger c_{k,+} + c_{k',-}^\dagger c_{k,-}) \right] + \sum_{k,k'} \left[\frac{\Gamma_{k,k'}^{(2)}}{2} (n_{d,+} + n_{d,-}) (c_{k',+}^\dagger c_{k,+} - c_{k',-}^\dagger c_{k,-}) \right] \quad (3.40)$$

com

$$\Gamma_{k,k'}^{(1)} = -V_k V_{k'}^* \frac{B_k^{(+)} + B_{k'}^{(+)}}{2}, \quad (3.41)$$

e

$$\Gamma_{k,k'}^{(2)} = V_k V_{k'}^* \frac{B_k^{(-)} + B_{k'}^{(-)}}{2}. \quad (3.42)$$

Como o efeito Kondo ocorre a baixas temperaturas, necessitamos de um Hamiltoniano efetivo no regime de baixas energias. Isso, significa que os espalhamento dos elétrons estão próximos do nível de Fermi k_F . Tais processos estão representados na figura (6). Aqui k_F denota o momento de Fermi.

Logo, vamos escrever os acoplamentos da seguinte maneira ,

$$\begin{aligned}
 J_{k,k'} &= |V|^2 \left[\frac{-\varepsilon_d}{\varepsilon_d^2 - |\gamma_F|^2} + \frac{\varepsilon_d + U}{(\varepsilon_d + U)^2 - |\gamma_F|^2} \right] \equiv J \\
 \Gamma_{k,k'} &= |V|^2 |\gamma| \frac{k-k'}{2} \left[\frac{1}{(\varepsilon_d)^2 - |\gamma_F|^2} - \frac{1}{(\varepsilon_d + U)^2 - |\gamma_F|^2} \right] \\
 \Gamma_{k,k'}^{(1)} &= -|V|^2 |\gamma| \frac{k+k'}{2} \left[\frac{1}{(\varepsilon_d)^2 - |\gamma_F|^2} - \frac{1}{(\varepsilon_d + U)^2 - |\gamma_F|^2} \right] \\
 \Gamma_{k,k'}^{(2)} &= -|V|^2 |\gamma| \frac{k+k'}{2} \left[\frac{1}{(\varepsilon_d)^2 - |\gamma_F|^2} + \frac{1}{(\varepsilon_d + U)^2 - |\gamma_F|^2} \right].
 \end{aligned} \tag{3.43}$$

Aqui definimos $\gamma_F = \gamma k_F$. Para obter a Eq. (3.43), substituímos k^2 e k'^2 por k_F^2 . Agora vamos escrever o Hamiltoniano efetivo com os acoplamentos (3.43) próximo do nível de Fermi da seguinte forma,

$$\begin{aligned}
 H &= J \sum_{k,k'} \left[S_{\pm}^z (c_{k',+}^\dagger c_{k,+} - c_{k',-}^\dagger c_{k,-}) + S_{\pm}^- c_{k',+}^\dagger c_{k,-} + S_{\pm}^+ c_{k',-}^\dagger c_{k,+} \right] \\
 &\quad + \sum_{k,k'} \Gamma_{k,k'}^{(1)} S_{\pm}^z (c_{k',+}^\dagger c_{k,+} + c_{k',-}^\dagger c_{k,-}) \sum_{k,k'} + \Gamma_{k,k'} (c_{k',+}^\dagger c_{k,-} d_-^\dagger d_+ - c_{k',-}^\dagger c_{k,+} d_+^\dagger d_-) \\
 &\quad + \sum_{k,k'} \frac{\Gamma_{k,k'}^{(2)}}{2} (n_{d,+} + n_{d,-}) (c_{k',+}^\dagger c_{k,+} - c_{k',-}^\dagger c_{k,-}).
 \end{aligned} \tag{3.44}$$

Note que mantemos os termos lineares em k, k' intactos. Isso é porque a soma nos momentos são para valores negativos e positivos. Portanto, a soma para esses valores na (3.43), $k+k'$ ou $k-k'$ pode ser aproximado para zero ou $\pm 2k_F$. Depois de feita a soma podemos escrever o Hamiltoniano (3.44) da seguinte forma,

$$\begin{aligned}
 H &= \sum_{kk'} \left[J_z (c_{k',+}^\dagger c_{k,+} - c_{k',-}^\dagger c_{k,-}) S_z + c_{k',+}^\dagger c_{k,-} S_- + c_{k',-}^\dagger c_{k,+} S_+ \right] \\
 &\quad + \Gamma \sum_{kk'>0} \left(c_{-k',+}^\dagger c_{k,-} S_- - c_{k',+}^\dagger c_{-k,-} S_- + c_{k',-}^\dagger c_{-k,+} S_+ - c_{-k',-}^\dagger c_{k,+} S_+ \right) \\
 &\quad + \Gamma^{(1)} \sum_{kk'>0} \left[S^z (c_{k',+}^\dagger c_{k,+} - c_{-k',+}^\dagger c_{-k,+} + c_{k',-}^\dagger c_{k,-} - c_{-k',-}^\dagger c_{-k,-}) \right] \\
 &\quad + \frac{\Gamma^{(2)}}{2} \sum_{kk'>0} \left[(c_{k',+}^\dagger c_{k,+} - c_{-k',+}^\dagger c_{-k,+} + c_{k',-}^\dagger c_{k,-} - c_{-k',-}^\dagger c_{-k,-}) \right],
 \end{aligned} \tag{3.45}$$

note que no Hamiltoniano acima, temos termos com espalhamentos *backward* e *forward*. No entanto, podemos ver que espalhamentos *backward* ocorrem em inter-banda enquanto os espalhamentos *forward* ocorrem em intra-banda. Estes espalhamentos *backward* e *forward* estão exemplificados

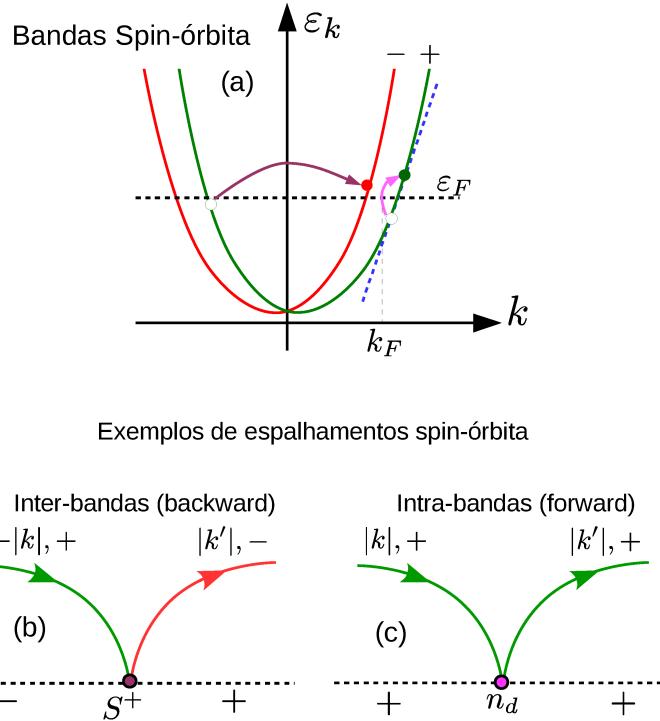


Figura 6: (a) Bandas de spin-órbita para os elétrons de condução. Em baixas temperaturas, os processos permitidos envolvem energias próximo do nível de Fermi ϵ_F . As setas magenta e roxa exemplificam, respectivamente, os espalhamentos intra-banda (*forward*) e inter-banda (*backward*). As figuras (b) e (c) são diagramas representativos de processos típicos que está contido no Hamiltoniano 3.37 e 3.40, respectivamente. (58)

na Figura (6b) e (6c). Aqui os acoplamentos efetivos são dados por,

$$J = |V|^2 \left[-\frac{\epsilon_d}{\epsilon_d^2 - |\gamma_F|^2} + \frac{\epsilon_d + U}{(\epsilon_d + U)^2 - |\gamma_F|^2} \right]. \quad (3.46)$$

A interpretação física do acoplamento efetivo J , conseguido através da redução do modelo de Anderson ao Hamiltoniano efetivo tipo Kondo, é que os spins dos elétrons da banda de condução poderão blindar o spin da impureza magnética. Esse acoplamento J tem a tendência de ordenar antiparalelamente os spins dos elétrons e o spin da impureza, o que denomina-se acoplamento anti-ferromagnético (59). Os outros acoplamentos efetivos que surgem devido a interação spin-órbita são da seguinte forma,

$$\Gamma = |V|^2 \gamma_F \left[\frac{1}{(\epsilon_d)^2 - |\gamma_F|^2} - \frac{1}{(\epsilon_d + U)^2 - |\gamma_F|^2} \right], \quad (3.47)$$

$$\Gamma^{(1)} = -|V|^2 \gamma_F \left[\frac{1}{(\varepsilon_d)^2 - |\gamma_F|^2} - \frac{1}{(\varepsilon_d + U)^2 - |\gamma_F|^2} \right], \quad (3.48)$$

e

$$\Gamma^{(2)} = -|V|^2 \gamma_F \left[\frac{1}{(\varepsilon_d)^2 - |\gamma_F|^2} + \frac{1}{(\varepsilon_d + U)^2 - |\gamma_F|^2} \right]. \quad (3.49)$$

Nessa base os processos de *spin-flip* envolvendo os Hamiltoniano 3.37 e 3.40 não são claramente identificados. Para uma melhor visualização vamos transformá-lo de volta para a base *up* e *down*, como segue.

3.2 Hamiltoniano efetivo na base *up* e *down*

Como mencionado acima, o Hamiltoniano está na base de helicidade e precisamos realizar a transformação de volta para a base original de spin a fim de identificar mais facilmente os processos de *spin-flip* envolvendo os Hamiltoniano 3.37 e 3.40 . Usando as seguintes transformações,

$$\begin{aligned} c_{k,+} &= \frac{1}{\sqrt{2}} (c_{k,\uparrow} + ie^{-i\theta} c_{k,\downarrow}) \\ c_{k,-} &= \frac{1}{\sqrt{2}} (e^{i\theta} c_{k,\uparrow} - ic_{k,\downarrow}). \end{aligned} \quad (3.50)$$

Após a transformação note que o Hamiltoniano toma a forma

$$\begin{aligned} H = & \sum_{k,k'} J_{k,k'} \left[S^z (c_{k',\uparrow}^\dagger c_{k,\uparrow} - c_{k',\downarrow}^\dagger c_{k,\downarrow}) + S^- c_{k',\uparrow}^\dagger c_{k,\downarrow} + S^+ c_{k',\downarrow}^\dagger c_{k,\uparrow} \right] \\ & + \frac{i}{2} \sum_{k,k'} \Gamma_{k,k'}^{(1)} [(c_{k',\uparrow}^\dagger c_{k,\uparrow} + c_{k',\downarrow}^\dagger c_{k,\downarrow}) (e^{-i\theta} d_\uparrow^\dagger d_\downarrow - e^{i\theta} d_\downarrow^\dagger d_\uparrow) + \Gamma_{k,k'}^{(2)} (e^{-i\theta} c_{k',\uparrow}^\dagger c_{k,\downarrow} - e^{i\theta} c_{k',\downarrow}^\dagger c_{k,\uparrow}) (d_\uparrow^\dagger d_\uparrow + d_\downarrow^\dagger d_\downarrow)] \\ & + \frac{i}{2} \sum_{k,k'} \Gamma_{k,k'} \left[(c_{k',\uparrow}^\dagger c_{k,\uparrow} - c_{k',\downarrow}^\dagger c_{k,\downarrow}) (e^{-i\theta} d_\uparrow^\dagger d_\downarrow + e^{i\theta} d_\downarrow^\dagger d_\uparrow) - (d_\uparrow^\dagger d_\uparrow - d_\downarrow^\dagger d_\downarrow) (e^{-i\theta} c_{k',\uparrow}^\dagger c_{k,\downarrow} + e^{i\theta} c_{k',\downarrow}^\dagger c_{k,\uparrow}) \right] \end{aligned} \quad (3.51)$$

Note que o Hamiltoniano depende de uma fase $e^{\pm i\theta}$ que pode ser eliminada através de uma transformação de calibre. Com o Hamiltoniano na base original de spin, podemos verificar com mais facilidade o tipo de espalhamento envolvido no termo do tipo Elliot-Yafet e do termo Dzyaloshinskii-Moriya. O termo Dzyaloshinskii-Moriya é dado por

$$\begin{aligned} H_{DM} = & +\frac{i}{2} \sum_{k,k'} \Gamma_{k,k'} \left[(c_{k',\uparrow}^\dagger c_{k,\uparrow} - c_{k',\downarrow}^\dagger c_{k,\downarrow}) (e^{-i\theta} d_\uparrow^\dagger d_\downarrow + e^{i\theta} d_\downarrow^\dagger d_\uparrow) \right. \\ & \left. - (d_\uparrow^\dagger d_\uparrow - d_\downarrow^\dagger d_\downarrow) (e^{-i\theta} c_{k',\uparrow}^\dagger c_{k,\downarrow} + e^{i\theta} c_{k',\downarrow}^\dagger c_{k,\uparrow}) \right], \end{aligned} \quad (3.52)$$

enquanto o termo referente à Elliot-Yafet, é

$$\begin{aligned} H_{EY} = & \frac{i}{2} \sum_{k,k'} \Gamma_{k,k'}^{(1)} [(c_{k',\uparrow}^\dagger c_{k,\uparrow} + c_{k',\downarrow}^\dagger c_{k,\downarrow}) (e^{-i\theta} d_\uparrow^\dagger d_\downarrow - e^{i\theta} d_\downarrow^\dagger d_\uparrow) \\ & + \Gamma_{k,k'}^{(2)} (e^{-i\theta} c_{k',\uparrow}^\dagger c_{k,\downarrow} - e^{i\theta} c_{k',\downarrow}^\dagger c_{k,\uparrow}) (d_\uparrow^\dagger d_\uparrow + d_\downarrow^\dagger d_\downarrow)]. \end{aligned} \quad (3.53)$$

A fim de eliminar a fase presente nos termos 3.52 e 3.53 vamos definir uma matriz de transformação de calibre

$$U = \begin{bmatrix} e^{-i\frac{\theta}{2}} & 0 \\ 0 & e^{i\frac{\theta}{2}} \end{bmatrix} \quad (3.54)$$

que transforma os operadores de criação e aniquilação de elétrons e da impureza da seguinte forma,

$$\begin{pmatrix} \tilde{c}_{k,\uparrow} \\ \tilde{c}_{k,\downarrow} \end{pmatrix} = U^\dagger \begin{pmatrix} c_{k,\uparrow} \\ c_{k,\downarrow} \end{pmatrix} \quad (3.55)$$

ou explicitamente

$$\begin{aligned} c_{k,\uparrow} &= e^{-i\frac{\theta}{2}} \tilde{c}_{k,\uparrow} \\ c_{k,\downarrow} &= e^{i\frac{\theta}{2}} \tilde{c}_{k,\downarrow} \\ c_{k,\uparrow}^\dagger &= e^{i\frac{\theta}{2}} \tilde{c}_{k,\uparrow}^\dagger \\ c_{k,\downarrow}^\dagger &= e^{-i\frac{\theta}{2}} \tilde{c}_{k,\downarrow}^\dagger. \end{aligned} \quad (3.56)$$

Com isso obtemos

$$\begin{aligned} H = & \sum_{k,k'} J_{k,k'} [\tilde{S}^z (\tilde{c}_{k',\uparrow}^\dagger \tilde{c}_{k,\uparrow} - \tilde{c}_{k',\downarrow}^\dagger \tilde{c}_{k,\downarrow}) + \tilde{S}^- \tilde{c}_{k',\uparrow}^\dagger \tilde{c}_{k,\downarrow} + \tilde{S}^+ \tilde{c}_{k',\downarrow}^\dagger \tilde{c}_{k,\uparrow}] \\ & + \frac{i}{2} \sum_{k,k'} \Gamma_{k,k'}^{(1)} [(\tilde{c}_{k',\uparrow}^\dagger \tilde{c}_{k,\uparrow} + \tilde{c}_{k',\downarrow}^\dagger \tilde{c}_{k,\downarrow}) (\tilde{d}_\uparrow^\dagger \tilde{d}_\downarrow - \tilde{d}_\downarrow^\dagger \tilde{d}_\uparrow) + \Gamma_{k,k'}^{(2)} (\tilde{d}_\uparrow^\dagger \tilde{d}_\uparrow + \tilde{d}_\downarrow^\dagger \tilde{d}_\downarrow) (\tilde{c}_{k',\uparrow}^\dagger \tilde{c}_{k,\downarrow} - \tilde{c}_{k',\downarrow}^\dagger \tilde{c}_{k,\uparrow})] \\ & + \frac{i}{2} \sum_{k,k'} \Gamma_{k,k'} [(\tilde{c}_{k',\uparrow}^\dagger \tilde{c}_{k,\uparrow} - \tilde{c}_{k',\downarrow}^\dagger \tilde{c}_{k,\downarrow}) (\tilde{d}_\uparrow^\dagger \tilde{d}_\downarrow + \tilde{d}_\downarrow^\dagger \tilde{d}_\uparrow) - (\tilde{d}_\uparrow^\dagger \tilde{d}_\uparrow - \tilde{d}_\downarrow^\dagger \tilde{d}_\downarrow) (\tilde{c}_{k',\uparrow}^\dagger \tilde{c}_{k,\downarrow} + \tilde{c}_{k',\downarrow}^\dagger \tilde{c}_{k,\uparrow})]. \end{aligned} \quad (3.57)$$

Agora, definindo

$$\mathbf{s}_{kk'} = \frac{1}{2} \sum_{ss'} c_{k's}^\dagger \tau_{ss'} c_{ks'} \quad (3.58)$$

e

$$\mathbf{S} = \frac{1}{2} \sum_{ss'} d_s^\dagger \tau_{ss'} d_{s'} \quad (3.59)$$

com τ sendo as matrizes de Pauli incluindo a matriz identidade τ^0 . Após algumas manipulações algébricas podemos verificar que o Hamiltoniano efetivo (3.57) pode ser escrito de uma forma mais compacta por

$$\begin{aligned} H = & \sum_{k,k'} J_{k,k'} \left[S_{imp}^z S_{k,k'}^z + S_{imp}^- S_{k,k'}^+ + S_{imp}^+ S_{k,k'}^- \right] - 2i \sum_{kk'} \Gamma_{kk'} (\mathbf{s}_{k'k} \times \mathbf{S}) \cdot \hat{\mathbf{y}} \\ & + 2 \sum_{k,k'} \Gamma_{k,k'}^{(1)} S_{k,k'}^{(0)} S_{imp}^y + 2 \sum_{k,k'} \Gamma_{k,k'}^{(2)} S_{imp}^{(0)} S_{k,k'}^{(y)}. \end{aligned} \quad (3.60)$$

O termo correspondente que representa a interação Dzyaloshinskii-Moriya é da forma ,

$$H_{DM} = -2i \sum_{kk'} \Gamma_{kk'} (\mathbf{s}_{k'k} \times \mathbf{S}) \cdot \hat{\mathbf{y}}, \quad (3.61)$$

onde $\mathbf{s}_{k'k}$ e \mathbf{S} são operadores de spins dos elétrons da banda de condução e dos spins da impureza respectivamente. O termo Dzyaloshinskii-Moriya é a interação entre os spins dos elétrons de condução e o spin da impureza magnética mediado pelo acoplamento efetivo $\Gamma_{k,k'}$. Na presença dessa interação, mecanismos de espalhamentos com *spin-flip* do tipo *backward* poderão surgir em sistemas unidimensionais com impureza magnética.

Os dois últimos termos do Hamiltoniano (3.60) descrevem o mecanismo de Elliot-Yafet que é dado por

$$H_{EY} = 2 \sum_{k,k'} \Gamma_{k,k'}^{(1)} S_{k,k'}^{(0)} S_{imp}^y + 2 \sum_{k,k'} \Gamma_{k,k'}^{(2)} S_{imp}^{(0)} S_{k,k'}^{(y)}. \quad (3.62)$$

O mecanismo Elliott–Yafet é baseado no fato que os estados de Bloch não são autoestados de spin. Esse

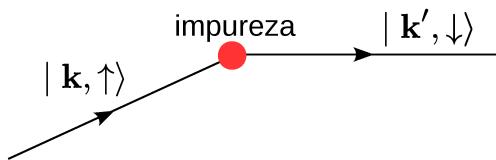


Figura 7: Representação esquemática dos processos de espalhamento do tipo Elliot-Yafet. Mecanismo está representado pela colisão dos elétrons itinerantes com uma impureza. Temos um elétron com spin *up* e após colidir com a impureza tem o momento invertido. Esse mecanismo não flipa o spin da impureza.

mecanismo dá origem a espalhamentos devido a impureza localizada no material quando um evento não magnético ou uma colisão altera o spin dos elétrons itinerantes. Um elétron com um *spin up* e momento inicial sofre uma colisão com uma impureza, então essa colisão pode alterar o estado desse elétron para um momento e spin diferente do inicial. Com isso, uma alteração no momento induzirá uma alteração no spin. Portanto, um mecanismo que flipa o spin do elétron durante a colisão sem alterar o spin da impureza. A conservação do momento angular requer que o spin da impureza mude devido ao espalhamento, no entanto, a variação do momento angular nesse mecanismo é desprezível em relação ao potencial espalhador que é muito maior que essa variação de momento angular. Esse mecanismo de espalhamento de *spin-flip* está representado na figura 7. Refs. (25) e (26).

4 *Cálculo de T_K via grupo de renormalização*

Existem diversos problemas em física em que os fenômenos físicos ocorrem em escalas de energias bem distintas. Em muitos desses casos podemos encontrar um parâmetro pequeno definido pela razão entre duas dessas energias típicas e utilizar para fazer teoria de perturbação. Entretanto, existem fenômenos para os quais todas as escalas de energia são igualmente importantes. O efeito Kondo é um exemplo onde todas as escalas de energia são importantes. Nesse caso, não podemos encontrar um parâmetro perturbativo. É nesse contexto em que todas as escalas de energia são importantes para o fenômeno e que se insere o formalismo do grupo de renormalização. Esse formalismo permite-nos deduzir Hamiltonianos efetivos que descrevem fenômenos a baixas energias, levando em conta em certo aspecto todos os ingredientes relevantes de altas escalas de energias. Em outras palavras, os efeitos fundamentais da física de alta energia são acomodados em um pequeno conjunto de parâmetros que controlam a física de baixa energia. Em termos simples, a renormalização é construída sobre a ideia de que a física de baixa energia de um sistema só dependem de certa forma de características gerais da física de altas energias. (60).

No caso do efeito Kondo, estamos interessados no limite de baixas energias (também chamado infra-red). A questão é como chegar nesse regime de baixas energias partindo de um modelo formulado em escalas de altas energias. A ideia é, em vez de focar nos detalhes do modelo de altas energias, podemos monitorar as propriedades a baixas energias estudando o comportamento do sistema em função de escala de corte D . Se um sistema tem limite de baixa energia bem comportado, as excitações permanecerão imune a esta modificação do *cutoff*, e o modelo será descrito pelo Hamiltoniano de ponto fixo (60). Esta ideia de estudar o comportamento de um modelo de altas energias para um modelo de baixas energias é chamado grupo de renormalização, que consiste basicamente em dois passos:

1. Reescala a energia $cutoff D \rightarrow D' = \frac{D}{b}$, onde $b > 1$, e integramos sobre os graus de liberdade em uma faixa de energia $[D/b, D]$. Como consequência teremos um Hamiltoniano $H(D) \rightarrow H'$ (61).

2. Os parâmetros são então reescalados de volta para obtermos um novo Hamiltoniano, $H(D) = bH'$. Estes dois passos são então repetidos sucessivamente (61).

4.1 Poor Man's Scaling

Seguindo a ideia do grupo de renormalização discutida acima vamos discutir como eliminar os estados de alta energia do sistema. A ideia chave é integrar sobre os graus de liberdade correspondente dos modos às energias em um intervalo $E \in [D - \delta D, D]$ (62). O Hamiltoniano dependerá da escala de energia D e o Hamiltoniano tomará a forma $H(D)$, com o acoplamento efetivo reescrito como $J(D)$.

Em 1970 Phillip Anderson derivou um método perturbativo do grupo de renormalização, conhecido como *Poor Man's Scaling* (62), que consiste em eliminar perturbativamente as excitações envolvendo energias numa estreita faixa nas bordas da banda de condução (62–64). O termo Poor Man's refere ao fato que o comprimento da banda não é reescalada de volta para seu tamanho original depois de cada sucessiva renormalização. Isto simplifica o problema e não precisa reescalar o Hamiltoniano, eliminando o segundo passo no processo de grupo de renormalização, veja Ref.(61). Para conduzir este tratamento perturbativo, dividimos a banda de condução em estados, $0 < |\varepsilon_k| < D - \delta D$ que serão retidos e estados que denominaremos estados q dentro da faixa $|\delta D|$ da borda da banda que serão eliminados (ver Figura 10).

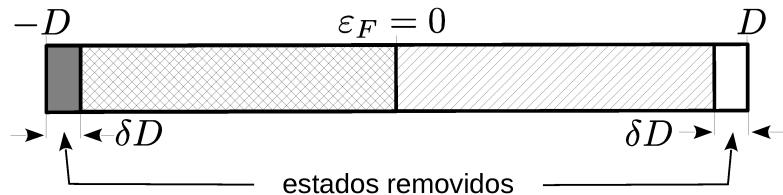


Figura 8: Representação esquemática do processo de renormalização via *poor man's scaling*. Partículas e buracos que serão removidos da banda condução através de uma redução de $|\delta D|$. Esses estados são de altas energias (estados intermediário) com energia designadas no texto por ε_q , cujos efeitos sobre os estados remanescentes são levados em conta perturbativamente.

Com a ideia do grupo de renormalização em mente vamos aplicá-la ao Hamiltoniano efetivo Kondo-Spin-Órbita. O Hamiltoniano Kondo-Spin-Órbita total Eq. (3.45) pode ser escrito como

$$H = H_0 + H_K + H_{DM} + H_{EY}, \quad (4.1)$$

onde,

$$H_0 = \sum_{k,s} \varepsilon_{k,s} c_{k,s}^\dagger c_{k,s} \quad (4.2a)$$

$$H_{DM} = \Gamma \sum_{kk'>0} (c_{-k',+}^\dagger c_{k,-} S_- - c_{k',+}^\dagger c_{-k,-} S_- + c_{k',-}^\dagger c_{-k,+} S_+ - c_{-k',-}^\dagger c_{k,+} S_+) \quad (4.2b)$$

$$H_{EY}^{(1)} = \Gamma^{(1)} \sum_{kk'>0} [S^z c_{k',+}^\dagger c_{k,+} - S^z c_{-k',+}^\dagger c_{-k,+} + S^z c_{k',-}^\dagger c_{k,-} - S^z c_{-k',-}^\dagger c_{-k,-}] \quad (4.2c)$$

$$H_{EY}^{(2)} = \frac{\Gamma^{(2)}}{2} \sum_{kk'>0} [(c_{k',+}^\dagger c_{k,+} - c_{-k',+}^\dagger c_{-k,+} + c_{k',-}^\dagger c_{k,-} - c_{-k',-}^\dagger c_{-k,-})] \quad (4.2d)$$

$$\begin{aligned} H_K &= J_\parallel^F \sum_{\substack{k,k'>0, \\ k,k'<0}} (c_{k',+}^\dagger c_{k,+} - c_{k',-}^\dagger c_{k,-}) S_z + J_\parallel^B \sum_{\substack{k>0,k'<0, \\ k<0,k'>0}} (c_{k',+}^\dagger c_{k,+} - c_{k',-}^\dagger c_{k,-}) S_z \\ &\quad J_\perp^F \sum_{\substack{k,k'>0, \\ k,k'<0}} [c_{k',+}^\dagger c_{k,-} S_- + c_{k',-}^\dagger c_{k,+} S_+] + J_\perp^B \sum_{\substack{k>0,k'<0, \\ k<0,k'>0}} [c_{k',+}^\dagger c_{k,-} S_- + c_{k',-}^\dagger c_{k,+} S_+]. \end{aligned} \quad (4.2e)$$

Aqui, separamos o acoplamento efetivo do Hamiltoniano Kondo (H_K) em espalhamentos *forward*, onde o ângulo de espalhamento é zero, e *backward*, onde o ângulo de espalhamento é de 180° representados respectivamente pelos acoplamentos J_δ^F e J_δ^B onde $\delta = \parallel, \perp$.

Seguindo Anderson, eliminamos flutuações de altas energias usando o formalismo da matriz de espalhamento (T-matrix), que descreve o espalhamento de um elétron de um estado inicial, $|k\rangle$ em um estado final $|k'\rangle$. A matriz de espalhamento como função da energia é definida como,

$$T(E) = \sum_{k,k'} \left[H_{k',k} + H_{k',k} \frac{1}{E - H_0} H_{k',k} + H_{k',k} \frac{1}{E - H_0} H_{k',k} \frac{1}{E - H_0} H_{k',k} + \dots \right], \quad (4.3)$$

onde $H_{k,k'}$ representa cada termo do Hamiltoniano (4.1). Aqui vamos calcular a T-matrix em segunda ordem utilizando o Hamiltoniano efetivo. Isto corresponde a renormalizar o Hamiltoniano em segunda ordem. Tomando em conta apenas os processos que espalham um elétron em um estado q na banda de condução superior, ou seja, cria um elétron em um estado q e em seguida aniquila esse mesmo elétron nesse mesmo estado q . Então podemos escrever a matriz de espalhamento em segunda ordem para o sistema da seguinte forma,

$$T(E) = \sum_{k,k'} \left[H_{k',k} + \sum_q \left(H_{k',q} \frac{1}{E - H_0} H_{q,k} \right) + \sum_q \left(H_{q,k} \frac{1}{E - H_0} H_{k',q} \right) \right]. \quad (4.4)$$

Como estamos interessados em eliminar os estados de alta energia na banda de condução definido como os estados de alta energia q , utilizando o formalismo da T-matrix, Eq. (4.4) e os termos do Ha-

miltoniano Eq. (4.2), podemos representá-los pela Figura 9, bem como escrever expressões analíticas da seguinte forma,

$$\begin{aligned}\Delta T = \omega \sum_{k,k'} \sum_{h',h} & \left[A c_{k',h'}^\dagger \sum_{h'',q>0} \left(c_{\pm q,h''} \frac{1}{E-H} c_{\pm q,h''}^\dagger \right) B c_{k,h} \right] \\ & + \omega \sum_{k,k'} \sum_{h',h} \left[B c_{k,h} \sum_{h'',q>0} \left(c_{\pm q,h''}^\dagger \frac{1}{E-H} c_{\pm q,h''} \right) A c_{k',h'}^\dagger \right].\end{aligned}\quad (4.5)$$

Aqui ω é a combinação dos acoplamentos do Hamiltoniano efetivo. Além disso, as letras A e B representam operadores de spin da impureza. Notando também que a soma em $q > 0$ estende-se para os estados intermediários e será diferente de zero somente quando $c_{\pm q,h''} c_{\pm q,h''}^\dagger \sim 1$. Isto garante que o estado intermediário estará desocupado. Essa figura representa todas as combinações permitidas de espalhamento de segunda ordem. Observe que teremos contribuições para todo p, p', h, h' e k, k' as

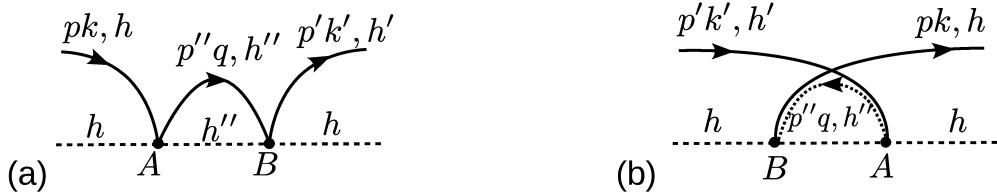


Figura 9: Diagramas de Feynman contribuindo para processos segunda-ordem para o caso geral. Aqui pk, h representando a helicidade, momento e o spin respectivamente. (a) representa espalhamentos do tipo partículas. Uma partícula com pk, h inicial espalha no spin da impureza representado pela letra A e em seguida propaga até o segundo espalhamento no spin da impureza representada pela letra B e sai com um estado final representado por $p'k', h'$. (b) representa espalhamento do tipo buraco. Neste caso, temos um elétron em um estado $p''q, h''$ que pode ser espalhado com *spin-flip* ou não para um estado final pk, h permanecendo um buraco que será aniquilado por um estado inicial $p'k', h'$

quais serão todas somadas.

Podemos observar no Hamiltoniano efetivo que existem sete acoplamentos efetivos, os quais serão todos renormalizados. O processo de renormalização acontece devido a eliminação dos espalhamentos virtuais na borda da banda, resultando em um Hamiltoniano que retém a sua forma original. Com isso teremos $J_\alpha \rightarrow J_\alpha + \delta J_\alpha$, $\Gamma \rightarrow \Gamma + \delta\Gamma$, $\Gamma^{(1)} \rightarrow \Gamma^{(1)} + \delta\Gamma^{(1)}$ e $\Gamma^{(2)} \rightarrow \Gamma^{(2)} + \delta\Gamma^{(2)}$. Portanto o acoplamento efetivo absorverá toda a renormalização procedente da eliminação dos estados de alta energia.

Como já foi mencionado acima, vamos agora definir o momento k como sendo um estado de alta energia denotado-o por q . Como por exemplo, vamos utilizar somente o termo correspondente ao

Hamiltoniano de Elliot-Yafet, $H_{EY} = H_{EY}^{(1)} + H_{EY}^{(2)}$. Em particular tomar o termo $H_{EY}^{(1)}$,

$$H_{EY}^{(1)} = \Gamma^{(1)} \sum_{kk'>0} \sum_{q>0} [S^z c_{k',+}^\dagger c_{q,+} - S^z c_{-k',+}^\dagger c_{-q,+} + S^z c_{k',-}^\dagger c_{q,-} - S^z c_{-k',-}^\dagger c_{-q,-}], \quad (4.6)$$

e

$$H_{DM} = \Gamma \sum_{kk'>0} (c_{-k',+}^\dagger c_{k,-} S_- - c_{k',+}^\dagger c_{-k,-} S_- + c_{k',-}^\dagger c_{-k,+} S_+ - c_{-k',-}^\dagger c_{k,+} S_+). \quad (4.7)$$

A contribuição destes dois termos dará

$$\begin{aligned} H_{DM} \frac{1}{(E - H_{00})} H_{EY}^{(1)} &= \Gamma \sum_{k',q>0} [c_{-k',+}^\dagger c_{q,-} S_- - c_{k',+}^\dagger c_{-q,-} S_- + c_{k',-}^\dagger c_{-q,+} S_+ - c_{-k',-}^\dagger c_{q,+} S_+] \frac{1}{E - H_0} \\ &\quad \times \Gamma^{(1)} \sum_{k',q>0} [S^z c_{q,+}^\dagger c_{k,+} - S^z c_{-q,+}^\dagger c_{-k,+} + S^z c_{q,-}^\dagger c_{k,-} - S^z c_{-q,-}^\dagger c_{-k,-}]. \end{aligned} \quad (4.8)$$

Note que $H_{00} \approx H_0$. Agora podemos ver os processos que vão renormalizar o Hamiltoniano calculando ΔT ,

$$\begin{aligned} \Delta T_{+-} &= \Gamma \Gamma^{(1)} \sum_{kk'>0} \sum_{q>0} \left[S^- c_{-k',+}^\dagger c_{q,-} \frac{1}{E - H_0} S^z c_{q,-}^\dagger c_{k,-} \right] \\ &\quad + \Gamma \Gamma^{(1)} \sum_{kk'>0} \sum_{q>0} \left[S^- c_{k',+}^\dagger c_{-q,-} \frac{1}{E - H_0} S^z c_{-q,-}^\dagger c_{-k,-} \right], \end{aligned} \quad (4.9)$$

$$\begin{aligned} \Delta T_{-+} &= -\Gamma \Gamma^{(1)} \sum_{kk'>0} \sum_{q>0} \left[S^+ c_{k',-}^\dagger c_{-q,+} \frac{1}{E - H_0} S^z c_{-q,+}^\dagger c_{-k,+} \right] \\ &\quad - \Gamma \Gamma^{(1)} \sum_{kk'>0} \sum_{q>0} \left[S^+ c_{-k',-}^\dagger c_{q,+} \frac{1}{E - H_0} S^z c_{q,+}^\dagger c_{k,+} \right]. \end{aligned} \quad (4.10)$$

Observe que há uma soma em q e necessitamos que os operadores de criação e aniquilação dos lados direitos das Eqs. (4.9) e (4.10), obedeça a relação de anti-comutação. Não podemos simplesmente passar para o lado direito impunemente, pois há operador H_0 que necessita obedecer a relação de anti-comutação. Vamos representar (4.9) e (4.10) de forma diagramática pela Figura. (10).

Esse processo é semelhante ao utilizado para derivar o Hamiltoniano efetivo do tipo Kondo do



Figura 10: Diagramas de Feynman contribuindo para renormalização de processos de espalhamento tipo partícula em segunda-ordem. (a) representa espalhamento correspondente a equação (4.9). Um elétron com estado inicial $\pm k, -$ espalha na impureza sem *flip-spin* conduzindo a um estado intermediário $\pm q, -$. O estado $\pm q, -$ então propaga e espalha novamente para um estado final com $\mp k', +$. (b) Em situação semelhante temos espalhamentos correspondente a equação (4.10).

capítulo anterior. Feito isso, podemos escrever a Eqs. (4.9) e (4.10) da seguinte forma,

$$\begin{aligned} \Delta T_{+-} = & \Gamma \Gamma^{(1)} \sum_{kk'>0} \sum_{q>0} \left(\frac{1}{E - \varepsilon_q + \varepsilon_{k'} - H_0} c_{q,-} c_{q,-}^\dagger \right) c_{-k',+}^\dagger c_{k,-} 2 S^- S^z \\ & + \Gamma \Gamma^{(1)} \sum_{kk'>0} \sum_{q>0} \left(\frac{1}{E - \varepsilon_q + \varepsilon_{k'} - H_0} c_{-q,-} c_{-q,-}^\dagger \right) c_{k',+}^\dagger c_{-k,-} 2 S^- S^z, \end{aligned} \quad (4.11)$$

e

$$\begin{aligned} \Delta T_{-+} = & -\Gamma \Gamma^{(1)} \sum_{kk'>0} \sum_{q>0} \left(\frac{1}{E - \varepsilon_q + \varepsilon_{k'} - H_0} c_{-q,+} c_{-q,+}^\dagger \right) c_{k',-}^\dagger c_{-k,+} 2 S^+ S^z \\ & - \Gamma \Gamma^{(1)} \sum_{kk'>0} \sum_{q>0} \left(\frac{1}{E - \varepsilon_q + \varepsilon_{k'} - H_0} c_{q,+} c_{q,+}^\dagger \right) c_{-k',-}^\dagger c_{k,+} 2 S^+ S^z. \end{aligned} \quad (4.12)$$

Vamos agora transformar a soma em integral e assumir uma densidade de estados como uma constante,

$$\sum_{q>0}^{D-\delta D < \varepsilon_q < D} \rightarrow \frac{1}{2} \int_{D-\delta D}^D \rho d\rho = \frac{\rho_0}{2} |\delta D|. \quad (4.13)$$

Note que há um fator $1/2$, isso é devido a soma correr apenas para q maior que zero. Como a energia E é medida com relação ao nível de Fermi, então $H_0 = \sum_{k,h} \varepsilon_k h c_{k,h}^\dagger c_{k,h}$ pode ser aproximado para zero nas Eqs. (4.11) e (4.12). Além disso, ε_q pertence ao intervalo $[D - \delta D, D]$, portanto $\varepsilon_q \sim D$. Com isso podemos escrever as Eqs. (4.11) e (4.12) da seguinte maneira,

$$\Delta T_{+-} = \sum_{kk'>0} \frac{\Gamma \Gamma^{(1)}}{2} \frac{\rho_0 |\delta D|}{(E - D + \varepsilon_{k'})} c_{-k',+}^\dagger c_{k,-} S^- + \sum_{kk'>0} \frac{\Gamma \Gamma^{(1)}}{2} \frac{\rho_0 |\delta D|}{(E - D + \varepsilon_{k'})} c_{k',+}^\dagger c_{-k,-} S^- \quad (4.14)$$

$$\Delta T_{-+} = - \sum_{kk'>0} \frac{\Gamma \Gamma^{(1)}}{2} \frac{\rho_0 |\delta D|}{(E - D + \varepsilon_{k'})} c_{k',-}^\dagger c_{-k,+} (-S^+) - \sum_{kk'>0} \frac{\Gamma \Gamma^{(1)}}{2} \frac{\rho_0 |\delta D|}{(E - D + \varepsilon_{k'})} c_{-k',-}^\dagger c_{k,+} (-S^+) \quad (4.15)$$

Aqui usamos as seguintes relações $S^- S^z = S^- / 2$ e $S^+ S^z = -S^+ / 2$ e ainda levamos em conta que

$c_q c_q^\dagger = 1$ ($c_q^\dagger c_q = 0$). Gostaríamos de chamar a atenção para o fato que termos que não depende do spin da impureza serão considerados como um potencial espalhador e serão descartados dos cálculos, vamos reter somente onde é levado o spin da impureza.

Agora estamos em condições de escrever uma expressão e verificar qual acoplamento será renormalizado. Utilizando a Eq. (4.14) e colocando os fatores comuns em evidência podemos escrever da seguinte maneira,

$$\begin{aligned}\Delta T_{+-} + \Delta T_{-+} &= \sum_{kk'>0} \frac{\Gamma^{(1)}}{2} \frac{\rho_0 |\delta D|}{(E - D + \varepsilon_{k'})} \left[(c_{-k',+}^\dagger c_{k,-} + c_{k',+}^\dagger c_{-k,-}) S^- + (c_{k',-}^\dagger c_{-k,+} + c_{-k',-}^\dagger c_{k,+}) S^+ \right] \\ &= \sum_{\substack{k>0, k'<0, \\ k<0, k'>0}} \frac{\Gamma^{(1)} \rho_0 |\delta D|}{2(E - D + \varepsilon_{k'})} \left[c_{k',+}^\dagger c_{k,-} S^- + c_{k',-}^\dagger c_{k,+} S^+ \right].\end{aligned}\quad (4.16)$$

Veja que a Eq. (4.16) renormaliza o acoplamento, J_\parallel^F , último termo do Hamiltoniano Kondo efetivo Eq. (4.2e). Então, levando em conta o espalhamento do tipo partícula podemos escrever a renormalização da seguinte forma,

$$\delta J_\perp^B = \frac{\Gamma^{(1)} \rho_0 |\delta D|}{2} \left(\frac{1}{E - D} \right). \quad (4.17)$$

Agora vamos trabalhar com espalhamento do tipo buraco. O cálculo será idêntico ao processo feito acima, no entanto, há uma inversão na ordem dos operadores de criação e aniquilação que podemos representar pela expressão analítica da seguinte forma,

$$\Delta T = \omega \sum_{k,k'} \sum_{h,h'} \left[B c_{k,h} \sum_{h'',q>0} \left(c_{\pm q,h''}^\dagger \frac{1}{E - H} c_{\pm q,h''} \right) A c_{k',h'}^\dagger \right]. \quad (4.18)$$

Observe a disposição dos operadores de spin da impureza, A e B , e dos operadores de criação e aniquilação, $c_{k',h'}^\dagger, c_{k,h}$, para caso de espalhamento do tipo partícula e espalhamento do tipo buraco. Prosseguiremos com o cálculo semelhante para o espalhamento do tipo partícula. Feito isso, vamos reescrever o Hamiltoniano efetivo ,

$$H_{EY}^{(1)} = \Gamma^{(1)} \sum_{kk'>0} \sum_{q>0} \left[S^z c_{k',+}^\dagger c_{q,+} - S^z c_{-k',+}^\dagger c_{-q,+} + S^z c_{k',-}^\dagger c_{q,-} - S^z c_{-k',-}^\dagger c_{-q,-} \right], \quad (4.19)$$

e

$$H_{DM} = \Gamma \sum_{kk'>0} \left(c_{-k',+}^\dagger c_{k,-} S_- - c_{k',+}^\dagger c_{-k,-} S_- + c_{k',-}^\dagger c_{-k,+} S_+ - c_{-k',-}^\dagger c_{k,+} S_+ \right). \quad (4.20)$$

Repetindo os mesmos passos feitos anteriormente, lembrando que estamos utilizando somente o termo correspondente ao Hamiltoniano de Elliot-Yafet e DM, teremos

$$\begin{aligned} H_{EY}^{(1)} \frac{1}{E - H_{00}} H_{DM} &= \Gamma^{(1)} \sum_{k',q>0} \left[S^z c_{q,+}^\dagger c_{k,+} - S^z c_{-q,+}^\dagger c_{-k,+} + S^z c_{q,-}^\dagger c_{k,-} - S^z c_{-q,-}^\dagger c_{-k,-} \right] \frac{1}{E - H_0} \\ &\quad \times \Gamma \sum_{k',q>0} \left[c_{-k',+}^\dagger c_{q,-} S^- - c_{k',+}^\dagger c_{-q,-} S^- + c_{k',-}^\dagger c_{-q,+} S^+ - c_{-k',-}^\dagger c_{q,+} S^+ \right]. \end{aligned} \quad (4.21)$$

Note que $H_{22} \approx H_0$. Agora podemos ver os processos que vão renormalizar o Hamiltoniano calculando ΔT ,

$$\begin{aligned} \Delta T_{+-} &= \Gamma \Gamma^{(1)} \sum_{kk'>0} \sum_{q>0} \left[S^z c_{q,-}^\dagger c_{k,-} \frac{1}{E - H_0} S^- c_{-k',+}^\dagger c_{q,-} \right] \\ &\quad + \Gamma \Gamma^{(1)} \sum_{kk'>0} \sum_{q>0} \left[S^z c_{-q,-}^\dagger c_{-k,-} \frac{1}{(E - H_0)} S^- c_{k',+}^\dagger c_{-q,-} \right], \end{aligned} \quad (4.22)$$

$$\begin{aligned} \Delta T_{-+} &= -\Gamma \Gamma^{(1)} \sum_{kk'>0} \sum_{q>0} \left[S^z c_{-q,+}^\dagger c_{-k,+} \frac{1}{E - H_0} S^+ c_{k',-}^\dagger c_{-q,+} \right] \\ &\quad - \Gamma \Gamma^{(1)} \sum_{kk'>0} \sum_{q>0} \left[S^z c_{q,+}^\dagger c_{k,+} \frac{1}{E - H_0} S^+ c_{-k',-}^\dagger c_{q,+} \right]. \end{aligned} \quad (4.23)$$

Novamente necessitamos que os operadores de criação e aniquilação do lado esquerdo das Eqs.(4.22) e (4.23), obejam a relação de anti-comutação, de modo que não podemos simplesmente passar para o lado direito impunemente, pois há o operador H_0 . Note que vamos representar as equações (4.22) e (4.23) de forma diagramática pela Figura.(11). Feito isso, podemos escrever a Eq. 4.22 e 4.23 da



Figura 11: Diagramas de Feynman contribuindo para renormalização de processos de espalhamento tipo buraco de segunda-ordem. (a) Representa espalhamento correspondente a equação (4.22). Neste caso, temos um elétron em um estado $\pm q, -$ que é espalhado sem *spin-flip* para um estado final $\pm k, -$. Esse espalhamento deixa um buraco que será aniquilado por um estado inicial $\pm k', -$. (b) De forma semelhante, representa espalhamento correspondente a equação (4.23).

seguinte forma,

$$\begin{aligned}\Delta T_{+-} = & \Gamma\Gamma^{(1)} \sum_{kk'>0} \sum_{q>0} \left(\frac{1}{E - \varepsilon_q + \varepsilon_{k'} - H_0} c_{q,-} c_{q,-}^\dagger \right) c_{k,-} c_{-k',+}^\dagger 2S^z S^- \\ & + \Gamma\Gamma^{(1)} \sum_{kk'>0} \sum_{q>0} \left(\frac{1}{E - \varepsilon_q + \varepsilon_{k'} - H_0} c_{-q,-} c_{-q,-}^\dagger \right) c_{-k,-} c_{k',+}^\dagger 2S^z S^-, \end{aligned} \quad (4.24)$$

e

$$\begin{aligned}\Delta T_{-+} = & -\Gamma\Gamma^{(1)} \sum_{kk'>0} \sum_{q>0} \left(\frac{1}{E - \varepsilon_q + \varepsilon_{k'} - H_0} c_{-q,+} c_{-q,+}^\dagger \right) c_{-k,+} c_{k',-}^\dagger 2S^z S^+ \\ & - \Gamma\Gamma^{(1)} \sum_{kk'>0} \sum_{q>0} \left(\frac{1}{E - \varepsilon_q + \varepsilon_{k'} - H_0} c_{q,+} c_{q,+}^\dagger \right) c_{k,+} c_{-k',-}^\dagger 2S^z S^+. \end{aligned} \quad (4.25)$$

Vamos novamente transformar a soma em integral e assumir uma densidade de estados como uma constante. Assim,

$$\sum_{q>0}^{-D < \varepsilon_q < -D + \delta D} \rightarrow \frac{1}{2} \int_{\frac{D}{b}}^D \rho d\rho \sim \frac{\rho_0}{2} D \left(1 - \frac{D}{b} \right) = \frac{\rho_0}{2} |\delta D|. \quad (4.26)$$

Note novamente o fator 1/2 devido a soma correr apenas para $q > 0$. Como a energia E é medida com relação ao nível de Fermi, então $H_0 = \sum_{k,h} \varepsilon_{k,h} c_{k',h}^\dagger c_{k,h}$ pode ser aproximado para zero nas Eq. (4.24) e (4.25). Além disso ε_q pertence ao intervalo $[-D, -D + \delta D]$, portanto $\varepsilon_q \sim -D$. Com isso podemos escrever as Eqs. (4.24) e (4.25) da seguinte maneira,

$$\Delta T_{+-} = \sum_{kk'>0} \frac{\Gamma\Gamma^{(1)}}{2} \frac{\rho_0 |\delta D|}{(E - D - \varepsilon_k)} c_{k,+} c_{k,-} c_{-k',+}^\dagger (-S^-) + \sum_{kk'>0} \frac{\Gamma\Gamma^{(1)}}{2} \frac{\rho_0 |\delta D|}{(E - D - \varepsilon_k)} c_{-k,-} c_{k',+}^\dagger (-S^-) \quad (4.27)$$

e

$$\Delta T_{-+} = - \sum_{kk'>0} \frac{\Gamma\Gamma^{(1)}}{2} \frac{\rho_0 |\delta D|}{(E - D - \varepsilon_k)} c_{-k,+} c_{k',-}^\dagger S^+ - \sum_{kk'>0} \frac{\Gamma\Gamma^{(1)}}{2} \frac{\rho_0 |\delta D|}{(E - D - \varepsilon_k)} c_{k,+} c_{-k',-}^\dagger S^+. \quad (4.28)$$

Como o espalhamento é do tipo buraco, temos que $c_q^\dagger c_q = 1$ o que garante que existe um elétron para ser aniquilado com momento q . Acima usamos as relações $S^z S^- = -S^-/2$ e $S^z S^+ = S^+/2$. Lembrando, termos que não dependem do spin da impureza serão considerado como um potencial espalhador e serão descartados dos cálculos, vamos reter somente termos onde é levado em conta o spin da impureza.

Agora estamos em condições de escrever uma expressão e verificar qual acoplamento será renormalizado devido aos espalhamentos do tipo buraco. Utilizando a Eq. (4.27) e colocando os fatores

comuns em evidência podemos escrever da seguinte maneira,

$$\begin{aligned}\Delta T_{+-} + \Delta T_{-+} &= \sum_{kk'>0} \frac{\Gamma^{(1)}}{2} \frac{\rho_0 |\delta D|}{(E - D - \varepsilon_k)} \left[(c_{k,-} c_{-k',+}^\dagger + c_{-k,-} c_{k',+}^\dagger) (-S^-) - (c_{-k,+} c_{k',-}^\dagger + c_{k,+} c_{-k',-}^\dagger) S^+ \right] \\ &= \sum_{\substack{k>0, k'<0, \\ k<0, k'>0}} \frac{\Gamma^{(1)} \rho_0 |\delta D|}{2(E - D - \varepsilon_k)} \left[c_{k',+}^\dagger c_{k,-} S^- + c_{k',-}^\dagger c_{k,-} S^+ \right].\end{aligned}\quad (4.29)$$

Efetuando as anti-comutações vemos que a Eq. (4.29) também renormaliza o acoplamento, J_\parallel^F , último termo do Hamiltoniano Kondo efetivo Eq.(4.2e), J_\perp^B , do Hamiltoniano Kondo. Então, para os espalhamentos do tipo buraco podemos escrever a renormalização da seguinte forma,

$$\delta J_\perp^B = \frac{\Gamma^{(1)} \rho_0 |\delta D|}{2} \left(\frac{1}{E - D} \right), \quad (4.30)$$

que é semelhante à combinação calculada anteriormente para espalhamento tipo partícula. Portanto, somando as duas contribuições temos

$$\delta J_\perp^B = \frac{\Gamma^{(1)} \rho_0 |\delta D|}{2} \left(\frac{1}{E - D} + \frac{1}{E - D} \right). \quad (4.31)$$

Assim podemos escrever a renormalização do espalhamento T devido a esses termos analisados,

$$T_{J_\perp^B} = (J_\perp^B + \delta J_\perp^B) \sum_{\substack{k>0, k'<0, \\ k<0, k'>0}} \left[c_{k',+}^\dagger c_{k,-} S^- + c_{k',-}^\dagger c_{k,-} S^+ \right]. \quad (4.32)$$

Perceba que o ato de eliminar os estados de alta energia conduziu a renormalização do acoplamento J_\perp^B da Eq. (4.2e), retendo a mesma forma do Hamiltoniano original. Esse processo é repetido para todos os outros termos do Hamiltoniano Eq. (4.2).

Como as excitações são sempre de baixas energias comparadas com D , a dependência da energia E pode ser descartada no denominador. Similarmente, estamos interessados em espalhamentos dos elétrons de condução escala energia da ordem de $k_B T$ próximo do nível de Fermi. De sorte que energias $\varepsilon_{k'}$ e ε_k também podem ser descartadas comparado com D . Assim da Eq. (4.31) podemos escrever

$$\delta J_\perp^B = \frac{\Gamma^{(1)} \rho_0 |\delta D|}{2} \left(\frac{1}{-D} + \frac{1}{-D} \right) = \Gamma^{(1)} \rho_0 |\delta D| \frac{1}{-D}. \quad (4.33)$$

O cálculo para os outros termos do Hamiltoniano é similar mas trabalhoso e extenso. Evitamos, portanto, escrever todas as equações completamente. O procedimento é o mesmo e vamos apenas

apresentar o resultado final,

$$\delta J_{\perp}^B = \Gamma \Gamma^{(1)} \rho_0 \frac{|\delta D|}{-D} - \Gamma \Gamma^{(2)} \rho_0 \frac{|\delta D|}{-D} - J_{\perp B} J_{\parallel F} \rho_0 \frac{|\delta D|}{-D} - J_{\perp F} J_{\parallel B} \rho_0 \frac{|\delta D|}{-D} \quad (4.34a)$$

$$\delta J_{\perp}^F = -J_{\perp B} J_{\parallel B} \rho_0 \frac{|\delta D|}{-D} - J_{\perp F} J_{\parallel F} \rho_0 \frac{|\delta D|}{-D} \quad (4.34b)$$

$$\delta J_{\parallel}^F = -J_{\perp F}^2 \rho_0 \frac{|\delta D|}{-D} - J_{\perp B}^2 \rho_0 \frac{|\delta D|}{-D} - \Gamma^2 \rho_0 \frac{|\delta D|}{-D} \quad (4.34c)$$

$$\delta J_{\parallel}^B = -2 J_{\perp F} J_{\perp B} \rho_0 \frac{|\delta D|}{-D} \quad (4.34d)$$

$$\delta \Gamma = -J_{\parallel F} \Gamma \rho_0 \frac{|\delta D|}{-D} + J_{\perp B} \Gamma^{(1)} \rho_0 \frac{|\delta D|}{-D} - J_{\perp B} \Gamma^{(2)} \rho_0 \frac{|\delta D|}{-D} \quad (4.34e)$$

$$\delta \Gamma^{(1)} = +J_{\perp B} \Gamma \rho_0 \frac{|\delta D|}{-D} + J_{\parallel F} \Gamma^{(2)} \rho_0 \frac{|\delta D|}{-D} \quad (4.34f)$$

$$\delta \Gamma^{(2)} = J_{\parallel F} \Gamma^{(1)} \rho_0 \frac{|\delta D|}{-D}. \quad (4.34g)$$

Note que $\delta \ln D = \delta D/D$. Como $\delta D < 0$ e ($D > 0$), segue que $\delta D/D = -|\delta D|/D$. Assim $-|\delta D|/D = \delta \ln D$. Além disso, dividindo ambos os lados da Eq.(4.32) por $\delta \ln D$ temos

$$\begin{aligned} \frac{dJ_{\perp B}}{d \ln D} &= -\rho_0 J_{\perp F} J_{\parallel B} - \rho_0 J_{\perp B} J_{\parallel F} + \rho_0 \Gamma \Gamma^{(1)} - \rho_0 \Gamma \Gamma^{(2)} \\ \frac{dJ_{\perp F}}{d \ln D} &= -\rho_0 J_{\perp F} J_{\parallel F} - \rho_0 J_{\perp B} J_{\parallel B} \\ \frac{dJ_{\parallel F}}{d \ln D} &= -\rho_0 J_{\perp F}^2 - \rho_0 J_{\perp B}^2 - \rho_0 \Gamma^2 \\ \frac{dJ_{\parallel B}}{d \ln D} &= -2 \rho_0 J_{\perp F} J_{\perp B} \\ \frac{d\Gamma}{d \ln D} &= \rho_0 J_{\perp B} \Gamma^{(1)} - \rho_0 J_{\perp B} \Gamma^{(2)} - \rho_0 J_{\parallel F} \Gamma \\ \frac{d\Gamma^{(1)}}{d \ln D} &= \rho_0 J_{\parallel}^F \Gamma^{(2)} + \rho_0 \Gamma J_{\perp B} \\ \frac{d\Gamma^{(2)}}{d \ln D} &= \rho_0 J_{\parallel}^F \Gamma^{(1)}. \end{aligned} \quad (4.35)$$

Vamos verificar o caso particular na ausência da interação spin-órbita (SO), temos a solução para $\Gamma = \Gamma^{(1)} = \Gamma^{(2)} = 0$, portanto as equações acima reduzem a equação de renormalização usual para J no caso do modelo Kondo isotrópico quando $J_{\perp F} = J_{\parallel F} = J_{\perp B} = J_{\parallel B} = J$, dessa forma podemos escrever,

$$\frac{dJ}{d \ln D} = -2 \rho_0 J^2, \quad (4.36)$$

e na ausência interação spin-órbita,

$$\frac{d\Gamma}{d\ln D} = \frac{d\Gamma^{(1)}}{d\ln D} = \frac{d\Gamma^{(2)}}{d\ln D} = 0. \quad (4.37)$$

Dessa forma, para encontrar a temperatura Kondo, T_K , necessitamos integrar os dois lados da Eq.4.36,

$$\begin{aligned} -2\rho_0 \int_D^{D^*} d\ln D &= \int_J^{J(\infty)} \frac{dJ}{J^2} \\ -2\rho_0 \ln\left(\frac{k_B T}{D}\right) &= -\frac{1}{\infty} - \left(-\frac{1}{J}\right) \\ \ln\left(\frac{k_B T}{D}\right) &= -\frac{1}{2\rho_0 J} \\ \frac{k_B T}{D} &= \text{Exp}\left(-\frac{1}{2\rho_0 J}\right) \\ k_B T &= D \text{Exp}\left(-\frac{1}{2\rho_0 J}\right) \end{aligned} \quad (4.38)$$

Embora esta teoria de *scaling*, que é baseada em teoria de perturbação, faz sentido quando somente o valor do acoplamento renormalizado $\rho_0 J \ll 1$, isso nos garante que podemos continuar usando as equações de *scaling* (65). A solução desta equação, neste caso, conduz para a conhecida temperatura Kondo,

$$k_B T_K^0 = D \text{Exp}(-1/2\rho_0 J), \quad (4.39)$$

essa solução analítica é apenas para o caso isotrópico.

4.2 Cálculo numérico de T_K

Para saber como a temperatura Kondo, T_K , se comporta para o caso mais geral, temos que resolver as equações, Eq.(4.35). Devido ao fato das equações estarem acopladas entre si, torna-se difícil obter uma solução analítica para tal caso, com o tratamento feito acima. Após a resolução numérica das equações acopladas Eq.(4.35) podemos extrair a escala de energia do modelo efetivo. A solução numérica da (4.35) nos fornece o acoplamento como uma função da largura de banda reduzida. No modelo Kondo convencional o acoplamento diverge quando $D \rightarrow 0$. É justamente esta divergência que fornece uma definição para a temperatura Kondo dentro da análise do grupo de renormalização. Usando a mesma idéia para encontrar o valor da temperatura Kondo na presença da interação spin-órbita, vamos tomar T_K o valor de D na qual a solução numérica diverge. Nesse ponto, podemos

dizer que encontramos o valor da temperatura T_K . Esse é ponto onde o acoplamento diverge $J \rightarrow \infty$ de onde obtemos a temperatura Kondo T_k do sistema.

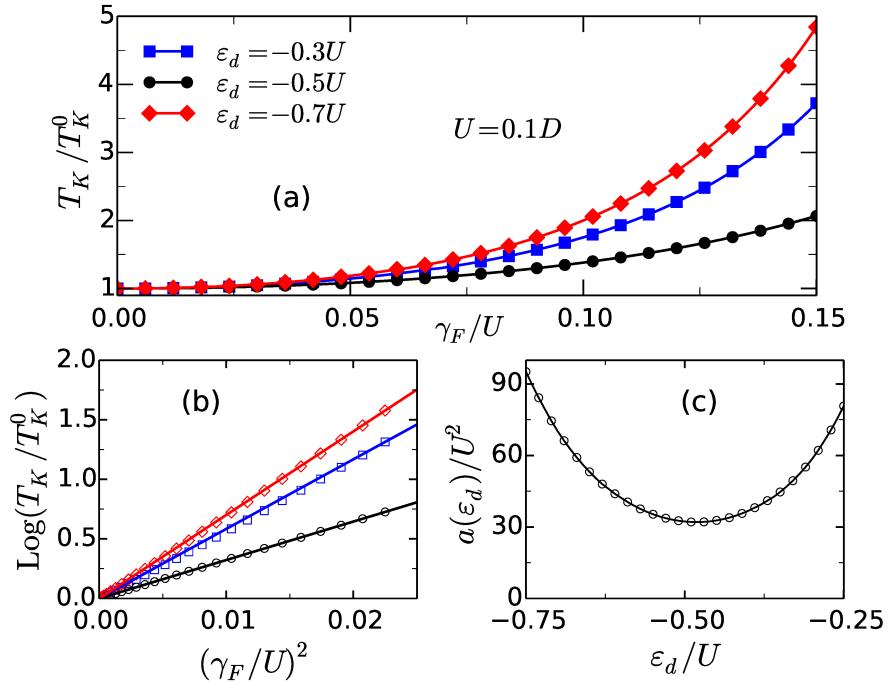


Figura 12: (a) temperatura Kondo escalada vs γ_F/U para diferentes valores de ε_d e $U = 0.1$. $\varepsilon_d = -0.5U$ corresponde exatamente ao ponto de simetria *particle-hole* do modelo de Anderson. Note que diferentes comportamentos de T_K para ε_d acima e abaixo de 0.05. T_K^0 é a temperatura Kondo calculada na ausência da interação SO, $\gamma = 0$. (b) $\text{Log}(T_K/T_K^0)$ vs γ_F/U (símbolos). As linhas sólidas mostram a conexão entre o primeiro e último ponto de cada conjunto de dados, servindo como um guia para os olhos. Estas linhas sugerem que T_K depende de γ_F exponencialmente como $T_K = T_K^0 \exp(a\gamma_F^2)$, onde a é uma função de ε_d . (c) a/U^2 ε_d/U resultados extraídos do painel (b).

Para obtermos nosso resultado para temperatura Kondo foram utilizados os seguintes valores para os parâmetros de acordo com a Ref. (14) $U/\Delta = 20$ com $\Delta = \pi V^2/2D$. Aqui D é o *cutoff* dentro que a banda está linearizada em $k = k_F$. Embora em pontos quânticos U é praticamente fixo, podemos controlar Δ com potenciais locais, portanto a razão U/Δ pode ser controlada facilmente em experimentos com pontos quânticos. Na Figura(12) mostramos a temperatura Kondo T_K/T_K^0 vs γ_F/U para três valores de energia da impureza ε_d . Onde T_K^0 é a temperatura Kondo na ausência da interação spin-órbita, $\gamma = 0$. Podemos notar que de forma semelhante ao que foi obtido na Ref. (13), T_K sempre aumenta com γ_F , mas isto é mais evidente para $\varepsilon_d \neq -U/2$ [quadrados (azul) e diamantes (vermelho)]. O aumento de T_K com γ_F para $\varepsilon_d = -U/2$ contrasta com resultados apresentados pela Ref. (13) que prediz uma temperatura T_K usando o mesmo procedimento, mas concorda com todos os outros resultados obtidos nas Refs. (14) e (16). A principal razão para esse contraste nos resultados utilizando RGA é porque as referências citadas desprezaram as correções no acoplamento Kondo

J devido a interação spin-órbita. Outro ponto é que para $\varepsilon_d = -0.7U$ e $\varepsilon_d = -0.3U$ onde o nível da impureza está colocado simetricamente abaixo e acima do ponto *particle-hole*(ph), respectivamente, o aumento de T_K com γ_F não é simétrico. Este comportamento diverge com os resultados apresentados na Ref. (13). Esta assimetria é, no entanto, diferente da assimetria observada nos resultados das Refs. (14) e (16), porque consideram o nível de Fermi próximo da parte inferior da banda de condução, aqui assumimos ε_F longe dela.

Na ausência de solução analítica para o conjunto de equações diferenciais (4.35) procuramos obter qualitativamente a dependência da T_K com γ_F . Para fazer isso, na Fig. 12(b) plotamos $\text{Log}(T_K/T_K^0)$ vs $(\gamma_G/U)^2$ para três valores de ε_d como na Fig. 12(a). Os símbolos correspondem aos resultados numéricos mostrado na 12(a) enquanto as linhas sólidas corresponde a conexão do primeiro e último ponto dos dados. Podemos notar que esta função linear descreve muito bem todos os dados. Isto sugere uma dependência de T_K com γ_F quando $T_K = T_K^0 \exp(a\gamma_F^2)$, aqui a é uma função positiva dos parâmetros do modelo de Anderson (e. g. Δ, U, ε_d). Aqui, mantendo todos os outros parâmetros fixo, a claramente mostra uma forte dependência de ε_d . Para extrair como a pode alterar com ε_d , na Fig. 12(c) plotamos a vs ε_d/U . Note que a curva é quase parabólica com um mínimo próximo ao ponto de simetria partícula-buraco. Isto é, no entanto, assimétrico em $\varepsilon_d = -U/2$ por causa da assimetria partícula-buraco introduzida pelo termo $H_{EY}^{(2)}$ do Hamiltoniano efetivo.

Para um melhor entendimento da origem da assimetria partícula-buraco nos resultados da Fig. 12, vamos olhar atentamente as equações do grupo de renormalização (4.35). Mostraremos que, de fato, o termo que quebra a simetria partícula-buraco das (4.35) é $H_{EY}^{(2)}$. Portanto, vamos negligenciar $H_{EY}^{(2)}$ nas equações de renormalização Eqs. (4.35). Então removeremos a última equação da Eq. (4.35) e faremos $\Gamma_2 = 0$ em todas as outras equações do conjunto de equações (4.35). Agora, relembramos que Γ e Γ_1 são funções ímpares ε_d sobre a mudança $\varepsilon_d = -U/2 + \delta$ para $\varepsilon_d = -U/2 - \delta$ para qualquer $\delta < U/2$. Portanto, para uma dada condição inicial para J (que é o caso, dado J é par) podemos ver que através da mudança $\varepsilon_d = -U/2 + \delta$ para $\varepsilon_d = -U/2 - \delta$ que a derivada de ambos Γ e Γ_1 apenas altera seus sinais. Agora, por causa da derivada de J depende do produto $\Gamma\Gamma_1$ ou Γ^2 , que são ambos pares, o valor da temperatura T_K extraído da solução das equações (4.35) é par em relação à partícula-buraco, embora Γ e Γ_1 sejam ímpares. Isto mostra que, de fato, é o termo adicional $H_{EY}^{(2)}$ responsável pela quebra da simetria partícula-buraco das equações de renormalização.

5 Conclusão

Em suma, estudamos o efeito da interação spin-órbita Rashba e Dresselhaus no regime kondo em sistemas unidimensionais. Para essa proposta, foi utilizado o modelo de Anderson na presença da interação spin-órbita. Mostramos que o modelo Kondo é um caso particular do modelo de Anderson utilizando a técnica de operador de projeção. Então derivamos um Hamiltoniano efetivo que contém o conhecido termo Dzyaloshinskii-Moryia (DM) e um termo adicional descrevendo processos de espalhamento do mesmo tipo de Eliott-Yafet (EY). Utilizando técnicas do grupo de renormalização, mostramos a dependência da temperatura Kondo em função da interação spin-órbita. Encontramos que a interação SO modifica, substancialmente, a temperatura Kondo do sistema. Os nossos resultados mostram que há contribuição da ISO no comportamento da temperatura Kondo T_K mesmo no regime de simetria partícula-buraco. Os nossos resultados mostram que a dependência de T_K com o ISO difere do que foi encontrado na Ref. (13). Por exemplo, descobrimos que a temperatura Kondo sempre aumenta, mesmo quando o sistema está no ponto de simetria partícula-buraco, que contrasta com os resultados apresentados na Ref. (13), mas de acordo com os encontrados nas Refs. (14) e (16). O desacordo entre nossos resultados e os de Ref. (13) é atribuído à correção no acoplamento Kondo devido à interação SO, negligenciadas no estudo anterior. Para chegar nesses resultados dividimos o Hamiltoniano efetivo 1D em dois tipos de espalhamento *forward* e *backward*. Aplicamos a técnica *Poor Man's Scaling* para deduzir um conjunto de equações de renormalizações para o acoplamento Kondo efetivo. Para obtermos a temperatura Kondo dependente do acoplamento spin-órbita (SO), resolvemos numericamente as equações acopladas. Nossa estudo mostra claramente o mecanismo de espalhamento dos elétrons de condução por uma impureza magnética introduzida pela a interação spin-órbita em um sistema 1D. Agora, o mais importante, mostramos como este mecanismo altera a temperatura Kondo do sistema. Portanto, acreditamos que este trabalho fornece uma descrição para compreensão da influência da interação spin-órbita no regime Kondo e sendo de grande importância para estudos futuros, especificamente em sistemas 1D.

As perspectivas futuras desse trabalho está dentre os problemas que nos propomos a tratar, talvez o mais atual seja o efeito de proximidade do sistema descrito acima com um supercondutor. Esse sis-

tema pode ser descrito por um Hamiltoniano no formalismo da teoria da supercondutividade proposta por John Bardeen, Leon Cooper, e John Robert Schrieffer (BCS). No contexto dessas perspectivas o mais natural é estender esse trabalho para descrever o efeito de proximidade do supercondutor num gás de elétrons com interação spin-órbita. Isso resulta em um supercondutor com fases e propriedades topológicas que sustentam férmiões de Majorana.

APÊNDICE A – Projeção do Hamiltoniano

No texto negligenciamos algumas passagens para deduzir o Hamiltoniano efetivo. Afim de entendermos como o Hamiltoniano efetivo foi derivado, vamos mostrar os passos necessários para tal objetivo. Com isso, vamos deduzir o Hamiltoniano Kondo, Hamiltoniano Dzyaloshinskii-Moryia e por fim o Hamiltoniano do tipo Elliot-Yafet. De início vamos deduzir o Hamiltoniano Kondo, começando no subespaço de ocupação simples $H_{10}(E - H_{00})^{-1} H_{01}$ com apenas um elétron no nível da impureza. Para isso, vamos somar no índice de helicidade h e aplicar a relação de anti-comutação no Hamiltoniano (3.32), obtemos

$$\begin{aligned}
H_{10}(E - H_{00})^{-1} H_{01} &= \sum_{k,k'} \frac{V_{k'}^* V_k}{2} [G^{(e)}(\varepsilon_d, \varepsilon_k) + G^{(e)}(\varepsilon_d, \varepsilon_{k'})] c_{k,+} c_{k',+}^\dagger d_+^\dagger d_+ \\
&\quad + \sum_{k,k'} \frac{V_{k'}^* V_k}{2} [G^{(e)}(\varepsilon_d, \varepsilon_k) + G^{(e)}(\varepsilon_d, \varepsilon_{k'})] c_{k,-} c_{k',-}^\dagger d_-^\dagger d_- \\
&\quad + \sum_{k,k'} \frac{V_{k'}^* V_k}{2} [G^{(e)}(\varepsilon_d, \varepsilon_k) + G^{(e)}(\varepsilon_d, \varepsilon_{k'})] c_{k,+} c_{k',-}^\dagger d_+^\dagger d_- \\
&\quad + \sum_{k,k'} \frac{V_{k'}^* V_k}{2} [G^{(e)}(\varepsilon_d, \varepsilon_k) + G^{(e)}(\varepsilon_d, \varepsilon_{k'})] c_{k,-} c_{k',+}^\dagger d_-^\dagger d_+ \\
&\quad + \sum_{k,k'} \frac{V_{k'}^* V_k}{2} [G^{(o)}(\varepsilon_d, \varepsilon_k) + G^{(o)}(\varepsilon_d, \varepsilon_{k'})] c_{k,+} c_{k',+}^\dagger d_+^\dagger d_+ \\
&\quad + \sum_{k,k'} \frac{V_{k'}^* V_k}{2} [-G^{(o)}(\varepsilon_d, \varepsilon_k) - G^{(o)}(\varepsilon_d, \varepsilon_{k'})] c_{k,-} c_{k',-}^\dagger d_-^\dagger d_- \\
&\quad + \sum_{k,k'} \frac{V_{k'}^* V_k}{2} [G^{(o)}(\varepsilon_d, \varepsilon_k) - G^{(o)}(\varepsilon_d, \varepsilon_{k'})] c_{k,+} c_{k',-}^\dagger d_+^\dagger d_- \\
&\quad + \sum_{k,k'} \frac{V_{k'}^* V_k}{2} [-G^{(o)}(\varepsilon_d, \varepsilon_k) + G^{(o)}(\varepsilon_d, \varepsilon_{k'})] c_{k,-} c_{k',+}^\dagger d_-^\dagger d_+, \quad (\text{A.1})
\end{aligned}$$

onde definimos

$$G^{(e)}(\varepsilon_d, \varepsilon_k) = \frac{1}{\varepsilon_d - \varepsilon_k} \sum_{j=0}^{\infty} \left(\frac{|\gamma|k}{\varepsilon_d - \varepsilon_k} \right)^{2j} = \frac{(\varepsilon_d - \varepsilon_k)}{(\varepsilon_d - \varepsilon_k)^2 - |\gamma|^2 k^2}, \quad (\text{A.2})$$

atente ao fato que podemos fazer uma manipulação na equação acima

$$-G^{(e)}(\varepsilon_d, \varepsilon_k) = \frac{(\varepsilon_k - \varepsilon_d)}{(\varepsilon_k - \varepsilon_d)^2 - |\gamma|^2 k^2}. \quad (\text{A.3})$$

Aqui definimos

$$G^{(o)}(\varepsilon_d, \varepsilon_k) = \frac{1}{\varepsilon_d - \varepsilon_k} \sum_{j=0}^{\infty} \left(\frac{|\gamma|k}{\varepsilon_d - \varepsilon_k} \right)^{2j+1} = \frac{|\gamma|k}{(\varepsilon_d - \varepsilon_k)^2 - |\gamma|^2 k^2}. \quad (\text{A.4})$$

Note que no $H_{10}(E - H_{00})^{-1}H_{01}$ podemos separar os operadores de criação e aniquilação dos elétrons da banda de condução e da impureza em termos diretos e indiretos $c_{k',+}^\dagger d_+^\dagger d_+$ e $c_{k,+} c_{k',-}^\dagger d_+^\dagger d_-$ respectivamente. Com isso, podemos agrupar os termos diretos nos termos que corresponde à $G^{(e)}(\varepsilon_d, \varepsilon_k)$ para extrair o termo corresponde a S^z e o termo do potencial espalhador do Hamiltoniano Kondo, vamos reescrever da seguinte forma

$$\begin{aligned} (c_{k,+} c_{k',+}^\dagger n_{d,+} + c_{k,-} c_{k',-}^\dagger n_{d,-}) &= \frac{(n_{d,+} - n_{d,-})}{2} (c_{k,+} c_{k',+}^\dagger - c_{k,-} c_{k',-}^\dagger) + \frac{(n_{d,+} + n_{d,-})}{2} (c_{k,+} c_{k',+}^\dagger + c_{k,-} c_{k',-}^\dagger) \\ &= \frac{1}{2} \left[+n_{d,+} c_{k,+} c_{k',+}^\dagger - n_{d,+} c_{k,-} c_{k',-}^\dagger - n_{d,-} c_{k,+} c_{k',+}^\dagger + n_{d,-} c_{k,-} c_{k',-}^\dagger \right. \\ &\quad \left. + n_{d,+} c_{k,+} c_{k',+}^\dagger + n_{d,+} c_{k,-} c_{k',-}^\dagger + n_{d,-} c_{k,+} c_{k',+}^\dagger + n_{d,-} c_{k,-} c_{k',-}^\dagger \right]. \end{aligned} \quad (\text{A.5})$$

Note que o primeiro termo do lado direito da igualdade corresponde exatamente ao termo S^z de Kondo, onde definimos $S^z = (n_{d,+} - n_{d,-})/2$ e o segundo termo corresponde ao potencial espalhador.

Como a soma nos índices k e k' corre para valores iguais e diferentes, portanto vamos realizar essa soma. Começando com $k = k'$ no termo que corresponde a S^z na Eq. (A.5)

$$\left[\frac{1}{2} (n_{d,+} - n_{d,-}) (c_{k,+} c_{k,+}^\dagger - c_{k,-} c_{k,-}^\dagger) \right] = S_\pm^z \left[(1 - c_{k,+}^\dagger c_{k,+}) - (1 - c_{k,-}^\dagger c_{k,-}) \right] = S_\pm^z \left[-c_{k,+}^\dagger c_{k,+} + c_{k,-}^\dagger c_{k,-} \right] \quad (\text{A.6})$$

e para $k \neq k'$

$$\left[\frac{1}{2} (n_{d,+} - n_{d,-}) (c_{k,+} c_{k',+}^\dagger - c_{k,-} c_{k',-}^\dagger) \right] = S_\pm^z \left[(c_{k,+} c_{k',+}^\dagger - c_{k,-} c_{k',-}^\dagger) \right] = S_\pm^z \left[-c_{k',+}^\dagger c_{k,+} + c_{k',-}^\dagger c_{k,-} \right]. \quad (\text{A.7})$$

O mesmo tratamento será feito para o potencial espalhador que corresponde ao segundo termo do lado direito da Eq. (A.5). Para o termo espalhador com a condição $k = k'$ temos

$$\frac{1}{2}(n_{d,+} + n_{d,-})(c_{k,+}c_{k,+}^\dagger + c_{k,-}c_{k,-}^\dagger) = \frac{n_{d,\pm}}{2}[(1 - c_{k,+}^\dagger c_{k,+}) + (1 - c_{k,-}^\dagger c_{k,-})] = \frac{n_{d,\pm}}{2}[2 - c_{k,+}^\dagger c_{k,+} - c_{k,-}^\dagger c_{k,-}] \quad (\text{A.8})$$

e para $k \neq k'$

$$\frac{1}{2}(n_{d,+} + n_{d,-})(c_{k,+}c_{k',+}^\dagger + c_{k,-}c_{k',-}^\dagger) = \frac{n_{d,\pm}}{2}[-c_{k',+}^\dagger c_{k,+} - c_{k',-}^\dagger c_{k,-}]. \quad (\text{A.9})$$

Escrevendo o caso geral, obtemos

$$(c_{k,+}c_{k',+}^\dagger n_{d,+} + c_{k,-}c_{k',-}^\dagger n_{d,-}) = -S_\pm^z(c_{k',+}^\dagger c_{k,+} - c_{k',-}^\dagger c_{k,-}) - \frac{n_{d,\pm}}{2}(c_{k,+}^\dagger c_{k,+} + c_{k,-}^\dagger c_{k,-}) + \frac{n_{d,+} + n_{d,-}}{2}. \quad (\text{A.10})$$

Aqui demonstramos apenas para o termo correspondente ao S^z (termos diretos) do Hamiltoniano Kondo. Portanto, precisamos demonstrar para os termos que corresponde a S^+ (termos indiretos) e S^- (termos indiretos). Para isso vamos utilizar os termos indiretos de $H_{10}(E - H_{00})^{-1}H_{01}$ que são os que possuem *spin-flip* proporcional à $G^{(e)}(\varepsilon_d, \varepsilon_k)$, temos

$$c_{k,+}c_{k',-}^\dagger d_+^\dagger d_- \rightarrow -c_{k',-}^\dagger c_{k,+} d_+^\dagger d_- = -c_{k',-}^\dagger c_{k,+} S^+ \quad (\text{A.11})$$

e

$$c_{k,-}c_{k',+}^\dagger d_-^\dagger d_+ \rightarrow -c_{k',+}^\dagger c_{k,-} d_-^\dagger d_+ = -c_{k',+}^\dagger c_{k,-} S^-. \quad (\text{A.12})$$

Portanto, temos todos os todos os termos do Hamiltoniano Kondo que resulta da projeção do estado de ocupação nula no estado de ocupação de um elétron. Esses termos representados nas Eqs. (A.10), (A.11) e (A.12) quando substituído em $H_{10}(E - H_{00})^{-1}H_{01}$ juntamente com a Eq. (A.3) fornece uma parte do Hamiltoniano Kondo efetivo. A outra parte vem do termo $H_{12}(E - H_{22})^{-1}H_{21}$ que será feito a seguir.

Para o termo que representa a dupla ocupação do espaço de Hilbert podemos proceder da mesma

forma. Então, somando e aplicando a relação de anti-comutação em cada termo de $H_{12}(E - H_{22})^{-1}H_{21}$

$$\begin{aligned}
 H_{12}(E - H_{22})^{-1}H_{21} = & \sum_{k,k'} \frac{V_{k'}^* V_k}{2} \left[-G^{(e)}(\varepsilon_{d+U}, \varepsilon_k) - G^{(e)}(\varepsilon_{d+U}, \varepsilon_{k'}) \right] c_{k',+}^\dagger c_{k,+} d_-^\dagger d_- \\
 & + \sum_{k,k'} \frac{V_{k'}^* V_k}{2} \left[-G^{(e)}(\varepsilon_{d+U}, \varepsilon_k) - G^{(e)}(\varepsilon_{d+U}, \varepsilon_{k'}) \right] c_{k',-}^\dagger c_{k,-} d_+^\dagger d_+ \\
 & + \sum_{k,k'} \frac{V_{k'}^* V_k}{2} \left[-G^{(e)}(\varepsilon_{d+U}, \varepsilon_k) - G^{(e)}(\varepsilon_{d+U}, \varepsilon_{k'}) \right] c_{k',-}^\dagger c_{k,+} d_- d_+^\dagger \\
 & + \sum_{k,k'} \frac{V_{k'}^* V_k}{2} \left[-G^{(e)}(\varepsilon_{d+U}, \varepsilon_k) - G^{(e)}(\varepsilon_{d+U}, \varepsilon_{k'}) \right] c_{k',+}^\dagger c_{k,-} d_+ d_-^\dagger \\
 & + \sum_{k,k'} \frac{V_{k'}^* V_k}{2} \left[-G^{(o)}(\varepsilon_{d+U}, \varepsilon_k) - G^{(o)}(\varepsilon_{d+U}, \varepsilon_{k'}) \right] c_{k',+}^\dagger c_{k,+} d_- d_-^\dagger \\
 & + \sum_{k,k'} \frac{V_{k'}^* V_k}{2} \left[G^{(o)}(\varepsilon_{d+U}, \varepsilon_k) + G^{(o)}(\varepsilon_{d+U}, \varepsilon_{k'}) \right] c_{k',-}^\dagger c_{k,-} d_+ d_+^\dagger \\
 & + \sum_{k,k'} \frac{V_{k'}^* V_k}{2} \left[-G^{(o)}(\varepsilon_{d+U}, \varepsilon_k) + G^{(o)}(\varepsilon_{d+U}, \varepsilon_{k'}) \right] c_{k',-}^\dagger c_{k,+} d_- d_+^\dagger \\
 & + \sum_{k,k'} \frac{V_{k'}^* V_k}{2} \left[G^{(o)}(\varepsilon_{d+U}, \varepsilon_k) - G^{(o)}(\varepsilon_{d+U}, \varepsilon_{k'}) \right] c_{k',+}^\dagger c_{k,-} d_+ d_-^\dagger \quad (\text{A.13})
 \end{aligned}$$

onde definimos

$$G^{(e)}(\varepsilon_d + U, \varepsilon_k) = \frac{1}{\varepsilon_d - \varepsilon_k} \sum_{j=0}^{\infty} \left(\frac{|\gamma| k}{\varepsilon_d + U - \varepsilon_k} \right)^{2j} = \frac{(\varepsilon_d + U - \varepsilon_k)}{(\varepsilon_d + U - \varepsilon_k)^2 - |\gamma|^2 k^2} \quad (\text{A.14})$$

e

$$G^{(o)}(\varepsilon_d + U, \varepsilon_k) = \frac{1}{\varepsilon_d + U - \varepsilon_k} \sum_{j=0}^{\infty} \left(\frac{|\gamma| k}{\varepsilon_d + U - \varepsilon_k} \right)^{2j+1} = \frac{|\gamma| k}{(\varepsilon_d + U - \varepsilon_k)^2 - |\gamma|^2 k^2}. \quad (\text{A.15})$$

Note que de forma análoga ao que foi no termo $H_{10}(E - H_{00})^{-1}H_{01}$ vamos fazer no seguinte termo $H_{12}(E - H_{22})^{-1}H_{21}$. Com isso, podemos agrupar os termos diretos nos termos que corresponde à $G^{(e)}(\varepsilon_d + U, \varepsilon_k)$ para extrair o termo que corresponde a S^z e o termo do potencial espalhador do

Hamiltoniano Kondo. Então vamos reescrever da seguinte forma

$$\begin{aligned}
 c_{k',+}^\dagger c_{k,+} n_{d,-} + c_{k',-}^\dagger c_{k,-} n_{d,+} &= -\frac{1}{2} (n_{d,+} - n_{d,-}) (c_{k',+}^\dagger c_{k,+} - c_{k',-}^\dagger c_{k,-}) \\
 &\quad + \frac{1}{2} (n_{d,+} + n_{d,-}) (c_{k',+}^\dagger c_{k,+} + c_{k',-}^\dagger c_{k,-}) \\
 &= \frac{1}{2} \left[-n_{d,+} c_{k',+}^\dagger c_{k,+} + n_{d,+} c_{k',-}^\dagger c_{k,-} + n_{d,-} c_{k',+}^\dagger c_{k,+} - n_{d,-} c_{k',-}^\dagger c_{k,-} \right. \\
 &\quad \left. + n_{d,+} c_{k',+}^\dagger c_{k,+} + n_{d,+} c_{k',-}^\dagger c_{k,-} + n_{d,-} c_{k',+}^\dagger c_{k,+} + n_{d,-} c_{k',-}^\dagger c_{k,-} \right].
 \end{aligned} \tag{A.16}$$

De forma semelhante na (A.5), podemos notar que o primeiro termo do lado direito da igualdade corresponde exatamente ao termo S^z de Kondo, onde definimos $S^z = (n_{d,+} - n_{d,-})/2$ e o segundo termo corresponde ao potencial espalhador. Aqui demonstramos apenas para o termo correspondente ao S^z (termos diretos) do Hamiltoniano Kondo. Portanto, precisamos demonstrar para os termos que corresponde a S^+ (termos indiretos) e S^- (termos indiretos). Para isso vamos utilizar os termos indiretos de $H_{12}(E - H_{22})^{-1}H_{21}$ que são os termos que possuem *spin-flip* proporcional à $G^{(e)}(\varepsilon_d + U, \varepsilon_k)$, temos

$$c_{k',-}^\dagger c_{k,+} d_- d_+^\dagger \rightarrow -c_{k',-}^\dagger c_{k,+} d_+^\dagger d_- = -c_{k',-}^\dagger c_{k,+} S^+ \tag{A.17}$$

e

$$c_{k',+}^\dagger c_{k,-} d_+ d_-^\dagger \rightarrow -c_{k',+}^\dagger c_{k,-} d_-^\dagger d_+ = -c_{k',+}^\dagger c_{k,-} S^- \tag{A.18}$$

Portanto, agora temos todos os todos os termos do Hamiltoniano Kondo que resulta da projeção do estado de ocupação nula e ocupação dupla no estado de ocupação de um elétron. Esses termos representados nas Eqs. (A.10), (A.11) e (A.12) quando substituído em $H_{10}(E - H_{00})^{-1}H_{01}$ juntamente com a Eq. (A.3) fornece uma parte do Hamiltoniano Kondo efetivo. A outra parte vem da substituição das Eqs. (A.16), (A.17), (A.18) e quando substituído no termo $H_{12}(E - H_{22})^{-1}H_{21}$ juntamente com a Eq. (A.14). Com isso, obtemos o convencional Hamiltoniano Kondo,

$$H_K = \sum_{k,k'} J_{k,k'} \left[S_\pm^z (c_{k',+}^\dagger c_{k,+} - c_{k',-}^\dagger c_{k,-}) + S_\pm^- c_{k',+}^\dagger c_{k,-} + S_\pm^+ c_{k',-}^\dagger c_{k,+} \right], \tag{A.19}$$

com o acoplamento Kondo,

$$J_{k,k'} = V_k V_{k'}^* \frac{A_k + A_{k'}}{2}, \tag{A.20}$$

onde,

$$A_k = -G^{(e)}(\varepsilon_d, \varepsilon_k) + G^{(e)}(\varepsilon_d, U, \varepsilon_k) = \frac{(\varepsilon_k - \varepsilon_d)}{(\varepsilon_d - \varepsilon_k)^2 - |\gamma|^2 k^2} + \frac{(\varepsilon_d + U - \varepsilon_k)}{(\varepsilon_d + U - \varepsilon_k)^2 - |\gamma|^2 k^2}. \quad (\text{A.21})$$

APÊNDICE B – Obtenção dos termos de Elliot-Yafet e Dzyaloshinskii-Moriya

Como mencionado acima, estamos interessados em como surge cada termo do Hamiltoniano efectivo. Para isso, vamos Lembrando que trabalhamos apenas para os termos diretos e indiretos correspondentes $G^{(e)}(\varepsilon_d, \varepsilon_k)$ na $H_{10}(E - H_{00})^{-1}H_{01}$. Agora vamos trabalhar nos termos diretos e indiretos que correspondem à $G^{(o)}(\varepsilon_d, \varepsilon_k)$. O procedimento é análogo feito acima. Com isso, observamos que há outro termo que nos dá a seguinte contribuição

$$\begin{aligned}
H_{EY} &= + \sum_{k,k'} \frac{V_{k'}^* V_k}{2} [G^{(o)}(\varepsilon_d, \varepsilon_k) + G^{(o)}(\varepsilon_d, \varepsilon_{k'})] c_{k,+} c_{k',+}^\dagger d_+^\dagger d_+ \\
&\quad + \sum_{k,k'} \frac{V_{k'}^* V_k}{2} [-G^{(o)}(\varepsilon_d, \varepsilon_k) - G^{(o)}(\varepsilon_d, \varepsilon_{k'})] c_{k,-} c_{k',-}^\dagger d_-^\dagger d_- \\
&\quad + \sum_{k,k'} \frac{V_{k'}^* V_k}{2} [-G^{(o)}(\varepsilon_{d+U}, \varepsilon_k) - G^{(o)}(\varepsilon_{d+U}, \varepsilon_{k'})] c_{k',+}^\dagger c_{k,+} d_-^\dagger d_- \\
&\quad + \sum_{k,k'} \frac{V_{k'}^* V_k}{2} [G^{(o)}(\varepsilon_{d+U}, \varepsilon_k) + G^{(o)}(\varepsilon_{d+U}, \varepsilon_{k'})] c_{k',-}^\dagger c_{k,-} d_+^\dagger d_+ \\
&= \sum_{k,k'} \frac{V_{k'}^* V_k}{2} [G^{(o)}(\varepsilon_d, \varepsilon_k) + G^{(o)}(\varepsilon_d, \varepsilon_{k'})] (c_{k,+} c_{k',+}^\dagger d_+^\dagger d_+ - c_{k,-} c_{k',-}^\dagger d_-^\dagger d_-) \\
&\quad + \sum_{k,k'} \frac{V_{k'}^* V_k}{2} [-G^{(o)}(\varepsilon_{d+U}, \varepsilon_k) - G^{(o)}(\varepsilon_{d+U}, \varepsilon_{k'})] (c_{k',+}^\dagger c_{k,+} d_-^\dagger d_- - c_{k',-}^\dagger c_{k,-} d_+^\dagger d_+). \quad (\text{B.1})
\end{aligned}$$

APENDICE APÊNDICE B – OBTENÇÃO DOS TERMOS DE ELLIOT-YAFET E DZYALOSHINSKII-MORIYA.

Em seguida vamos realizar uma manipulação algébrica no termo que corresponde $G^{(o)}(\varepsilon_d, \varepsilon_{k'})$ da seguinte forma

$$\begin{aligned} c_{k,+}c_{k',+}^\dagger n_{d,+} - c_{k,-}c_{k',-}^\dagger n_{d,-} &= \frac{1}{2}(n_{d,+} - n_{d,-})(c_{k,+}c_{k',+}^\dagger + c_{k,-}c_{k',-}^\dagger) + \frac{1}{2}(n_{d,+} + n_{d,-})(c_{k,+}c_{k',+}^\dagger - c_{k,-}c_{k',-}^\dagger) \\ &= \frac{1}{2} \left[n_{d,+}c_{k,+}c_{k',+}^\dagger + n_{d,+}c_{k,-}c_{k',-}^\dagger - n_{d,-}c_{k,+}c_{k',+}^\dagger - n_{d,-}c_{k,-}c_{k',-}^\dagger \right. \\ &\quad \left. + n_{d,+}c_{k,+}c_{k',+}^\dagger - n_{d,+}c_{k,-}c_{k',-}^\dagger + n_{d,-}c_{k,+}c_{k',+}^\dagger - n_{d,-}c_{k,-}c_{k',-}^\dagger \right]. \end{aligned} \quad (\text{B.2})$$

Note que os termos diretos do $H_{10}(E - H_{00})^{-1}H_{01}$ e que corresponde à $G^{(o)}(\varepsilon_d, \varepsilon_k)$ são os termos que dão origem ao termo de espalhamento do tipo Elliot-Yafet no Hamiltoniano efetivo (3.32). Novamente podemos somar nos índices k e k' para valores iguais e diferentes. Começando com o primeiro do termo do lado direito que corresponde ao $H_{EY}^{(1)}$, temos para $k = k'$

$$\left[\frac{1}{2}(n_{d,+} - n_{d,-})(c_{k,+}c_{k',+}^\dagger + c_{k,-}c_{k',-}^\dagger) \right] = S_\pm^z \left[(1 - c_{k,+}^\dagger c_{k,+}) + (1 - c_{k,-}^\dagger c_{k,-}) \right] = S_\pm^z \left[2 - c_{k,+}^\dagger c_{k,+} - c_{k,-}^\dagger c_{k,-} \right]. \quad (\text{B.3})$$

Novamente para $H_{EY}^{(1)}$. Para $k \neq k'$

$$\left[\frac{1}{2}(n_{d,+} - n_{d,-})(c_{k,+}c_{k',+}^\dagger + c_{k,-}c_{k',-}^\dagger) \right] = S_\pm^z \left[-c_{k',+}^\dagger c_{k,+} - c_{k',-}^\dagger c_{k,-} \right]. \quad (\text{B.4})$$

Para o primeiro termo do lado direito que corresponde ao $H_{EY}^{(2)}$, temos para $k = k'$

$$\begin{aligned} \frac{1}{2}(n_{d,+} + n_{d,-})(c_{k,+}c_{k',+}^\dagger - c_{k,-}c_{k',-}^\dagger) &= \frac{1}{2}(n_{d,+} + n_{d,-}) \left[(1 - c_{k,+}^\dagger c_{k,+}) - (1 - c_{k,-}^\dagger c_{k,-}) \right] \\ &= \frac{1}{2}(n_{d,+} + n_{d,-}) \left[-c_{k,+}^\dagger c_{k,+} + c_{k,-}^\dagger c_{k,-} \right] \end{aligned} \quad (\text{B.5})$$

e para $k \neq k'$

$$\frac{1}{2}(n_{d,+} + n_{d,-})(c_{k,+}c_{k',+}^\dagger - c_{k,-}c_{k',-}^\dagger) = \frac{1}{2}(n_{d,+} + n_{d,-}) \left[-c_{k',+}^\dagger c_{k,+} + c_{k',-}^\dagger c_{k,-} \right]. \quad (\text{B.6})$$

Agora podemos escrever o caso geral para o termo proporcional $G^{(o)}(\varepsilon_d, \varepsilon_{k'})$

$$c_{k,+}c_{k',+}^\dagger n_{d,+} - c_{k,-}c_{k',-}^\dagger n_{d,-} = -S_\pm^z (c_{k',+}^\dagger c_{k,+} + c_{k',-}^\dagger c_{k,-}) - \frac{1}{2}(n_{d,+} + n_{d,-})(c_{k',+}^\dagger c_{k,+} - c_{k',-}^\dagger c_{k,-}) + 2S_\pm^z. \quad (\text{B.7})$$

APENDICE APÊNDICE B – OBTENÇÃO DOS TERMOS DE ELLIOT-YAFET E DZYALOSHINSKII-MORIYA.

Para o termo correspondente a $G^{(o)}(\varepsilon_{d+U}, \varepsilon_{k'})$ podemos escrever diretamente da seguinte forma

$$c_{k',+}^\dagger c_{k,+} n_{d,-} - c_{k',-}^\dagger c_{k,-} n_{d,+} = \frac{1}{2} (n_{d,+} + n_{d,-}) (c_{k',+}^\dagger c_{k,+} - c_{k',-}^\dagger c_{k,-}) - \frac{1}{2} (n_{d,+} - n_{d,-}) (c_{k',+}^\dagger c_{k,+} + c_{k',-}^\dagger c_{k,-}). \quad (\text{B.8})$$

O termo acima, (B.7) e (B.8) quando substituído na (B.1) juntamente com (A.3) fornece o termo correspondente ao mecanismo de espalhamento do tipo Elliot-Yafet da seguinte forma

$$\begin{aligned} H_{EY} &= \sum_{k,k'} \frac{V_{k'}^* V_k}{2} [G^{(o)}(\varepsilon_d, \varepsilon_k) + G^{(o)}(\varepsilon_d, \varepsilon_{k'})] \\ &\quad \times \left[-S_{\pm}^z (c_{k',+}^\dagger c_{k,+} + c_{k',-}^\dagger c_{k,-}) - \frac{1}{2} (n_{d,+} + n_{d,-}) (c_{k',+}^\dagger c_{k,+} - c_{k',-}^\dagger c_{k,-}) \right] \\ &\quad + \sum_{k,k'} \frac{V_{k'}^* V_k}{2} [-G^{(o)}(\varepsilon_{d+U}, \varepsilon_k) - G^{(o)}(\varepsilon_{d+U}, \varepsilon_{k'})] \\ &\quad \times \left[\frac{1}{2} (n_{d,+} + n_{d,-}) (c_{k',+}^\dagger c_{k,+} - c_{k',-}^\dagger c_{k,-}) - \frac{1}{2} (n_{d,+} - n_{d,-}) (c_{k',+}^\dagger c_{k,+} + c_{k',-}^\dagger c_{k,-}) \right]. \quad (\text{B.9}) \end{aligned}$$

Agora vamos escrever o Hamiltoniano acima de uma forma mais compacta como

$$H_{EY} = \sum_{k,k'} \left[\Gamma_{k,k'}^{(1)} S_{\pm}^z (c_{k',+}^\dagger c_{k,+} + c_{k',-}^\dagger c_{k,-}) \right] + \sum_{k,k'} \left[\frac{\Gamma_{k,k'}^{(2)}}{2} (n_{d,+} + n_{d,-}) (c_{k',+}^\dagger c_{k,+} - c_{k',-}^\dagger c_{k,-}) \right]. \quad (\text{B.10})$$

Com

$$\Gamma_{k,k'}^{(1)} = -V_k V_{k'}^* \frac{B_k^{(+)} + B_{k'}^{(+)}}{2}, \quad (\text{B.11})$$

e

$$\Gamma_{k,k'}^{(2)} = V_k V_{k'}^* \frac{B_k^{(-)} + B_{k'}^{(-)}}{2}. \quad (\text{B.12})$$

Com $B_{k,k'}^{\pm}$ definido como

$$B_k^{(\pm)} = \pm G^o(\varepsilon_d, \varepsilon_k) - G^o(\varepsilon_d, U, \varepsilon_k) = \pm |\gamma| k \left[\frac{1}{(\varepsilon_d - \varepsilon_k)^2 - |\gamma|^2 k^2} \mp \frac{1}{(\varepsilon_d + U - \varepsilon_k)^2 - |\gamma|^2 k^2} \right]. \quad (\text{B.13})$$

Por fim, vamos prosseguir com o termo que representa o Hamiltoniano Dzyaloshinskii-Moriya (DM). Para isso, vamos utilizar os termos de *spin flip* de $H_{10}(E - H_{00})^{-1} H_{01}$ e $H_{12}(E - H_{22})^{-1} H_{21}$

APENDICE APÊNDICE B – OBTENÇÃO DOS TERMOS DE ELLIOT-YAFET E DZYALOSHINSKII-MORIYA.

correspondente $G^{(o)}(\varepsilon_d, \varepsilon_{k'})$ e $G^{(o)}(\varepsilon_d + U, \varepsilon_{k'})$. Assim podemos escrever

$$\begin{aligned}
H_{DM} &= \sum_{k,k'} \frac{V_{k'}^* V_k}{2} \left[\left(G^{(o)}(\varepsilon_d, \varepsilon_k) - G^{(o)}(\varepsilon_d, \varepsilon_{k'}) \right) c_{k,+} c_{k',-}^\dagger d_+^\dagger d_- \right. \\
&\quad + \left(-G^{(o)}(\varepsilon_d, \varepsilon_k) + G^{(o)}(\varepsilon_d, \varepsilon_{k'}) \right) c_{k,-} c_{k',+}^\dagger d_-^\dagger d_+ \\
&\quad + \left(-G^{(o)}(\varepsilon_{d+U}, \varepsilon_k) + G^{(o)}(\varepsilon_{d+U}, \varepsilon_{k'}) \right) c_{k',-}^\dagger c_{k,+} d_- d_+^\dagger \\
&\quad \left. + \left(G^{(o)}(\varepsilon_{d+U}, \varepsilon_k) - G^{(o)}(\varepsilon_{d+U}, \varepsilon_{k'}) \right) c_{k',+}^\dagger c_{k,-} d_+ d_-^\dagger \right] \\
&= \sum_{k,k'} \frac{V_{k'}^* V_k}{2} \left[\left(-G^{(o)}(\varepsilon_d, \varepsilon_k) + G^{(o)}(\varepsilon_d, \varepsilon_{k'}) \right) c_{k',-}^\dagger c_{k,+} d_+^\dagger d_- \right. \\
&\quad + \left(G^{(o)}(\varepsilon_d, \varepsilon_k) - G^{(o)}(\varepsilon_d, \varepsilon_{k'}) \right) c_{k',+}^\dagger c_{k,-} d_-^\dagger d_+ \\
&\quad + \left(G^{(o)}(\varepsilon_{d+U}, \varepsilon_k) - G^{(o)}(\varepsilon_{d+U}, \varepsilon_{k'}) \right) c_{k',-}^\dagger c_{k,+} d_+^\dagger d_- \\
&\quad \left. + \left(-G^{(o)}(\varepsilon_{d+U}, \varepsilon_k) + G^{(o)}(\varepsilon_{d+U}, \varepsilon_{k'}) \right) c_{k',+}^\dagger c_{k,-} d_-^\dagger d_+ \right]. \tag{B.14}
\end{aligned}$$

depois de um arranjo no termo entre parênteses podemos escrevê-lo da seguinte forma

$$\begin{aligned}
H_{DM} &= \sum_{k,k'} \frac{V_{k'}^* V_k}{2} \left[G^{(o)}(\varepsilon_d, \varepsilon_k) - G^{(o)}(\varepsilon_d, \varepsilon_{k'}) \right] \left(c_{k',+}^\dagger c_{k,-} d_+^\dagger d_- - c_{k',-}^\dagger c_{k,+} d_+^\dagger d_- \right) \\
&\quad + \sum_{k,k'} \frac{V_{k'}^* V_k}{2} \left[-G^{(o)}(\varepsilon_d + U, \varepsilon_k) + G^{(o)}(\varepsilon_d + U, \varepsilon_{k'}) \right] \left(c_{k',+}^\dagger c_{k,-} d_-^\dagger d_+ - c_{k',-}^\dagger c_{k,+} d_+^\dagger d_- \right) \\
&= \sum_{k,k'} \Gamma_{k,k'} \left(c_{k',+}^\dagger c_{k,-} d_+^\dagger d_- - c_{k',-}^\dagger c_{k,+} d_+^\dagger d_- \right) \tag{B.15}
\end{aligned}$$

onde definimos Aqui o acoplamento $\Gamma_{k,k'}$ é dado por

$$\Gamma_{k,k'} = V_k V_{k'}^* \frac{B_k^{(+)} - B_{k'}^{(+)}}{2}, \tag{B.16}$$

em que temos definido,

$$B_k^{(\pm)} = \pm G^o(\varepsilon_d, \varepsilon_k) - G^o(\varepsilon_d, U, \varepsilon_k) = \pm |\gamma| k \left[\frac{1}{(\varepsilon_d - \varepsilon_k)^2 - |\gamma|^2 k^2} \mp \frac{1}{(\varepsilon_d + U - \varepsilon_k)^2 - |\gamma|^2 k^2} \right]. \tag{B.17}$$

APÊNDICE C – Anexos

Kondo effect in a quantum wire with spin-orbit coupling

G. R. de Sousa, Joelson F. Silva, and E. Vernek

Instituto de Física, Universidade Federal de Uberlândia, Uberlândia, Minas Gerais 38400-902, Brazil

(Received 1 July 2016; published 9 September 2016)

The influence of spin-orbit interactions on the Kondo effect has been under debate recently. Studies conducted recently on a system composed of an Anderson impurity on a two-dimensional electron gas with a Rashba spin orbit have shown that it can enhance or suppress the Kondo temperature (T_K), depending on the relative energy level position of the impurity with respect to the particle-hole symmetric point. Here, we investigate a system composed of a single Anderson impurity, side coupled to a quantum wire with spin-orbit coupling (SOC). We derive an effective Hamiltonian in which the Kondo coupling is modified by the SOC. In addition, the Hamiltonian contains two other scattering terms, the so-called Dzyaloshinskii-Moriya interaction, known to appear in these systems, and another one describing processes similar to the Elliott-Yafet scattering mechanisms. By performing a renormalization group analysis on the effective Hamiltonian, we find that the correction on the Kondo coupling due to the SOC favors the enhancement of the Kondo temperature even in the particle-hole symmetric point of the Anderson model, agreeing with the numerical renormalization group results. Moreover, away from the particle-hole symmetric point, T_K always increases with the SOC, accordingly with a previous renormalization group analysis.

DOI: [10.1103/PhysRevB.94.125115](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.94.125115)

I. INTRODUCTION

The well-known Kondo effect is a many-body dynamical screening of a localized magnetic moment by the spins of itinerant electrons that occurs at temperatures below the so-called Kondo temperature (T_K) [1]. Originally observed in bulk magnetic alloys [2] with conspicuous transport features, this effect has been extensively studied in a few magnetic impurities coupled to one-dimensional (1D) [3–5] and two-dimensional (2D) [6–8] systems. Recently, a number of studies has discussed the effect of spin-orbit coupling (SOC) on the Kondo effect on two-dimensional systems. More specifically, the question of how the SOC modifies the Kondo effect in systems with an isolated magnetic impurity has gained more attention [9–16]. The influence of the effect of SOC on the Kondo physics has gained major interest mainly because the former has become remarkably attractive in condensed matter systems [17,18]. For example, SOC is the basic ingredient for many different phenomena, extending from the spin manipulation in the celebrated Datta-Das transistor [19] to more fundamental physics as in the quantum spin-Hall effect [20] and Majorana fermions [21].

Since the Kondo effect involves collectively the spins of the itinerant electrons, it is not surprising that SOC—that locks the electron spin with their momenta—will modify it. In fact, while in Ref. [9] there was found to be no change in the Kondo temperature with SOC, recent studies [10–13] have found a change in the Kondo temperature due to Rashba SOC. Apart from Ref. [12] that addresses the Kondo effect in graphene, the other ones report arguable results about similar systems. On the one hand, in Ref. [9] it was found that the Rashba SOC has essentially no effect on T_K . On the other, in Ref. [10], by renormalization group analysis (RGA), and in Refs. [11,13], using the numerical renormalization group (NRG), it is reported that T_K is dependent on the SOC, although the actual functional dependency obtained by the NRG seems to differ from the RGA approach. This controversy can be attributed to the different regimes in which the analysis was

carried out and to some approximations made in the RGA. We should stress that Malecki's idea of studying the effect of SOC on T_K using a standard Kondo model was incomplete. This became apparent in Ref. [10], in which it was shown that the standard Kondo model does not include all the scattering phenomena in the system.

Owing to the various studies discussed above, the effect of SOC on the Kondo temperature in two-dimensional systems has been quite well elucidated. In one-dimensional systems, however, the effect of SOC on the Kondo effect may be even more important and has yet to be investigated. The expected importance of SOC on the Kondo effect on 1D systems can be viewed in a simple way. As mentioned above, the Kondo effect is based on electron scatterings accompanied by spin-flip processes involving the spins of the conduction electrons and those of the local magnetic moments. At very low temperatures, energy conserving scatterings become more relevant as compared to nonconserving ones. Contrasting with the 2D case, in which energy conserving skew scatterings are also allowed, in 1D only forward or backward scattering can occur. In situations in which a backward scattering event suffered by the conduction electrons requires a flip of their spins, it is expectable that the SOC has a much stronger influence on the Kondo effect in 1D systems as compared to the 2D ones. Such spin-momentum locking is known to occur in strongly spin-orbit coupled 1D systems, such as InSb nanowires [22] and in the 1D edge states of topological insulators [23].

Motivated by the aforementioned peculiarities of the SOC in one-dimensional systems, we investigate the Kondo effect of a magnetic impurity, side coupled to a quantum wire with both Rashba [24] and Dresselhaus [25] SOC. For the impurity, we restrict ourselves to a spin- $\frac{1}{2}$ magnetic moment and model it as a single-level interacting quantum dot that couples to the conduction electrons in the quantum wire through tunneling matrix elements. By projecting the total Hamiltonian of the system onto a singly occupied subspace

Referências Bibliográficas

- 1 Friedel J. The distribution of electrons around impurities in monovalent metals. *Phil. Mag.* **43**:153-89, (1952).
- 2 Friedel J. Metallic alloys. *Nuovo Cimento* **7**:287-311, (1958).
- 3 N.W.Ashcroft and N.D. Mermin, *Solid State Physics*, Philadelphia, Holt-Saunders, (1976)
- 4 Zener. C, interaction between the d shells in the transition metal. *Physical Review* **81** Nr 3, 440-444 (1951)
- 5 J. Kondo, *Prog. Theor. Phys.* **32**, 37 (1964).
- 6 V. Madhavan, W. Chen, T. Jamneala, M.F. Crommie, and N. S. Wingreen, *Science* **280**, 567 (1998).
- 7 K. Nagaoka, T. Jamneala, M. Grobis, and M. F. Crommie, *Phys. Rev. Lett.* **88**, 077205 (2002).
- 8 G. A. Fiete, J. S. Hersch, E. J. Heller, H.C. Manoharan, C. P. Lutz, and D.M. Eigler, *Phys. Rev. Lett.* **86**, 2392 (2001).
- 9 M. A. Blachly and N. Giordano, *Phys. Rev. B* **51**, 12537 (1995).
- 10 P. Mohanty and R. A. Webb, *Phys. Rev. Lett.* **84**, 4481 (2000).
- 11 Masahiro Sato, Hisashi Aikawa, Kensuke Kobayashi, Shingo Katsumoto, and Yasuhiro Iye, *Phys. Rev. Lett.* **95**, 066801 (2005).
- 12 J. Malecki, *J. Stat. Phys.* **129**, 741 (2007).
- 13 M. Zarea S. E. Ulloa, and Nancy Sandler, *Phys. Rev. Lett.* **108**, 046601 (2012).
- 14 R. Žitko and J. Bonča, *Phys. Rev. B* **84**, 193411 (2011).
- 15 D. Mastrogiovanni, A. Wong, K. Ingersent, S. E. Ulloa, and N. Sandler, *Phys. Rev. B* **90**, 035426 (2014).
- 16 A. Wong, S. E. Ulloa, N. Sandler, and K. Ingersent, *Phys. Rev. B* **93**, 075148 (2016).
- 17 L. Isaev, D. F. Agterberg, and I. Vekhter, *Phys. Rev. B* **85**, 081107(R) (2012).
- 18 K. Kikoin and Y. Avishai, *Phys. Rev. B* **86**, 155129 (2012).
- 19 S. Grap, V. Meden, and S. Andergassen *Phys. Rev. B* **86**, 035143 (2012).

- 20 R. Winkler, Spin-Orbit Coupling Effects in Two-Dimensional Electron and Hole Systems, Springer Tracts in Modern Physics, Berlin, GER: Springer, Vol. 191 (2003).
- 21 A. Manchon, H. C. Koo, J. Nitta, S. M. Frolov R. A. Duine, Nat. Materials **14**, 871 (2015).
- 22 S. Datta and B. Das, Appl. Phys. Lett **56**, 665 (1990).
- 23 B. Andrei Bernevig, Taylor L. Hughes, Shou-Cheng Zhang, Science **314**, 1757 (2006).
- 24 N. Read and Dmitry Green, Phys. Rev. B **61** 10267 (2000).
- 25 R. J. Elliott, Phys. Rev. **96**, 266 (1954).
- 26 Y. Yafet, J. Appl. Phys. **39**, 853 (1968).
- 27 A. C. Gossard, T. Y. Kometani, and J. H. Wernick, J. of App. Phys. **39**, 849 (1968).
- 28 Albert Fert, Jean-Luc Duvail, and Thierry Valet Phys. Rev. B **52**, 6513 (1995).
- 29 J. T. Batley, M. C. Rosamond, M. Ali, E. H. Linfield, G. Burnell, and B. J. Hickey Phys. Rev. B **92**, 220420(R) (2015).
- 30 de Haas, de Boer, and D.J. van den Berg, The electrical resistance of gold, copper and lead at low temperatures, Physica **1**, 1115 (1933).
- 31 K. Yosida, Theory of Magnetism, Springer Series in Solid State Sciences, Berlin, GER: spring verlag, Vol. 122 (1996)
- 32 D. K. C. MacDonald, K. Mendelssohn, Proc. Roy. Soc. **202**, 103 (1950).
- 33 D. K. C. MacDonald, B. Pearson and I. M. Templeton, Proc. Roy. Soc. **266**, 161 (1962).
- 34 Matthias C. Luffe, Janik Kailasvuori, and Tamara S. Nunner, Phy. Rev. B **075**, 326 (2011).
- 35 Victor Galitski, Ian B. Spielman, Spin-orbit coupling in quantum gases, Nature **494**, 49–54 (2013)
- 36 B. Berche, N. Bolívar, A. López, E. Medina, Condensed Matter Physics, Vol. 12, No 4, pp. 707-716 (2009)
- 37 Y. A. Bychkov and E. I. Rashba, J. Phys. C **17**, 6039 (1984).
- 38 G. Dresselhaus, Phys. Rev. **100**, 580 (1955).
- 39 Harjeet Kaur, Sudhir R.Jainb, Sham S.Malika, Physics Letters A **378** 388–392, (2014)
- 40 B. Andrei Bernevig, J. Orenstein, and Shou-Cheng Zhang, Phys. Rev. Lett. **97**, 236601 (2006).
- 41 P. I. Tamborenea, M. A. Kuroda, and F. L. Bottesi Phys. Rev. B **68**, 245205 (2003)
- 42 I. Zutic, J. Fabian, and S. Das-Sarma, Rev. Modern Phys. **76**, 323 (2004).
- 43 S. Maekawa, Concepts in Spin Electronics, Oxford, UK: Oxford University Press, (2006).

- 44 J. Fabian, A. Matos-Abiague, C. Ertler, P. Stano, and I. Zutic, *Acta Physica Slovaca* **57**, 565 (2007).
- 45 M. I. Dyakonov, *Spin Physics in Semiconductors*, Berlin, GER: Springer, (2008).
- 46 T. Dietl, D. D. Awschalom, and M. Kaminska, *Spintronics Semiconductors and Semimetals*, London, UK: Academic Press Inc. (2008).
- 47 D. D. Awschalom, R. A. Buhrman, J. M. Daughton, S. von Molnar, and M. L. Roukes, *Spin Electronics* Dordrecht, NED: Kluwer Acad. Publ. (2009).
- 48 M. W. Wu, J. H. Jiang, and M. Q. Weng, *Phys. Reports* **493**, 61 (2010).
- 49 E.Y. Tsymbal and I. Zutic, *Handbook of Spin Transport and Magnetism* eds. Boca Raton, FL: Chapman and Hall/CRC (2011).
- 50 J. Xia, W. Ge, and K. Chang, *Semiconductor Spintronics*, Singapore: World Scientific, (2012).
- 51 S. Maekawa, S. O. Valenzuela, E. Saitoh, and T. Kimura, *Spin Current*, Oxford: Oxford University Press, (2012).
- 52 J. R. Schrieffer and P. A. Wolff, Relation between the Anderson and Kondo Hamiltonians, *Phys. Rev.* **149**, 491 (1966)
- 53 Ivan S Oliveira; Vitor L B Jesus. *Introdução a física do estado sólido*. São Paulo: Editora Livraria da Física, (2005)
- 54 A. C. Hewson, *The Kondo Problem to Heavy Fermions*, Cambridge, UK: Cambridge University Press, (1997).
- 55 I. van Weperen, B. Tarasinski, D. Eeltink, V. S. Pribiag, S. R. Plissard, E. P. A. M. Bakkers, L. P. Kouwenhoven, and M. Wimmer, *Phys. Rev. B* **91** 201413 (2015).
- 56 M. Z. Hasan and C. L. Kane, *Rev. Mod. Phys.* **82**, 3045 (2010)
- 57 Guoxing Miao, *Spintronics Driven by Superconducting Proximity Effect*, Página consultada em 25 Maio de 2016 [<http://cdn.intechopen.com/pdfs-wm/48107.pdf>]
- 58 G. R. de Sousa, Joelson F. Silva, and E. Vernek. Kondo temperature in spin-orbit coupled one dimensional systems, *Phys. Rev. B* **94**, 125115 (2016).
- 59 P. W. Anderson, Antiferromagnetism. Theory of superexchange interaction, *Phys. Rev.* **79** (1950)
- 60 Coleman Piers, *Introduction to Many Body Physics*, Cambridge, UK: Cambridge University Press, (2015).
- 61 Andriy H. Nevidomskyy, *The Kondo Model and Poor Man's Scaling*, Página consultada em 4 de Janeiro de 2016, [<http://www.cond-mat.de/events/correl15/manuscripts/nevidomskyy.pdf>].
- 62 P. W. Anderson, A poor man's derivation of scaling laws for the Kondo problem, *J. Phys. C* **3**, 2436 (1970).

- 63 A. C. Hewson, J. Phys. Condens. Matter **18**, 1815 (2006).
- 64 H. R. Krishna-murthy, J. W. Wilkins, and K. G. Wilson, Phys. Rev. B **21**, 1003 (1980).
- 65 Sólyom Jenő, Fundamentals of the Physics of Solids, Heidelberg, GER: Springer, Vol. 3. 746 p.