



Laercio Costa Ribeiro

Efeitos de Muitos Corpos nas Propriedades de Transporte em Sistemas Nanoscópicos. Efeito Kondo e Magnetismo em Estruturas de Pontos Quânticos

Tese de Doutorado

Tese apresentada ao Programa de Pós-graduação em Física do Departamento de Física da PUC-Rio como requisito parcial para obtenção do título de Doutor em Física

Orientador: Prof. Enrique Victoriano Anda

Rio de Janeiro
Abril de 2010

Livros Grátis

<http://www.livrosgratis.com.br>

Milhares de livros grátis para download.



Laercio Costa Ribeiro

Efeitos de Muitos Corpos nas Propriedades de Transporte em Sistemas Nanoscópicos. Efeito Kondo e Magnetismo em Estruturas de Pontos Quânticos

Tese apresentada ao Programa de Pós-graduação em Física do Departamento de Física do Centro Técnico Científico da PUC-Rio como requisito parcial para obtenção do título de Doutor em Física. Aprovada pela Comissão Examinadora abaixo assinada.

Prof. Enrique Victoriano Anda

Orientador
Departamento de Física — PUC-Rio

Prof. George Balster Martins

Universidade de Oakland-UO, Michigan, USA

Prof. Edson Vernek

Universidade Federal de Uberlândia - UFU

Prof. Mucio Amado Continentino

Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas - CBPF-RJ

Prof. José Roberto Iglesias

Universidade Federal do Rio Grande do Sul-UFRGS

Prof. José Eugenio Leal

Coordenador Setorial do Centro Técnico Científico — PUC-Rio

Rio de Janeiro, 9 de Abril de 2010

Todos os direitos reservados. É proibida a reprodução total ou parcial do trabalho sem autorização da universidade, do autor e do orientador.

Laercio Costa Ribeiro

Graduou-se em licenciatura Plena em Física na Universidade Federal Rural do Rio de Janeiro, obteve o título de Mestre em Ciências Físicas pela Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro.

Ficha Catalográfica

Ribeiro, Laercio Costa

Efeitos de Muitos Corpos nas Propriedades de Transporte em Sistemas Nanoscópicos. Efeito Kondo e Magnetismo em Estruturas de Pontos Quânticos / Laercio Costa Ribeiro; orientador: Enrique Victoriano Anda. — Rio de Janeiro : PUC–Rio, Departamento de Física, 2010.

v., 151 f: il. ; 29,7 cm

1. Tese (doutorado) - Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro, Departamento de Física.

Inclui referências bibliográficas.

1. Física – Tese. 2. pontos quânticos. 3. efeito Kondo. 4. sistemas fortemente correlacionados. 5. correlação de spin. 6. nuvem Kondo. 7. informação quântica. 8. porta quântica. I. Anda, Enrique Victoriano. II. Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro. Departamento de Física. III. Título.

CDD: 510

Agradecimentos

Ao meu orientador, Prof. Enrique Anda, pela amizade e atenção durante o desenvolvimento desta tese;

Aos professores do departamento de física da PUC-Rio que de forma direta ou indireta contribuíram para minha formação;

Aos colaboradores Edson Vernek, George Martins e Guilherme Chiepple pelas inúmeras discussões e esclarecimentos sobre muitos dos temas abordados nesta tese;

Aos amigos e colegas de trabalho do CEFET-RJ, em especial ao Marcelo Oliveira e a Sheila Cristina da equipe de Física pelo excelente convívio durante esses anos. Também aos meus alunos com os quais tive a oportunidade de me aprimorar como pessoa e como educador;

Aos professores Pedro Orellana e Marcelo Apel da Universidade de Antofagasta por terem me acolhido em sua Universidade durante a minha estadia no Chile;

Aos inúmeros amigos e estudantes da PUC-Rio, em especial aos estudantes Fábio, Thiago, Alex, Fernando, Paulina, Mariana, Joana, Kelly e Vanessa, Lucas, Jeferson e Renato pelos agradáveis momentos que tivemos durante estes anos. Também aos amigos Rafael Dutra, Anderson Cortinez e Ney Cipriano que me acompanharam desde o mestrado e que hoje são meus colegas de profissão;

As secretárias Márcia e Giza, e também ao Julinho, pelo suporte durante todo este tempo em que eu estive na PUC-Rio;

A meus pais e amigos pelo enorme incentivo durante todo o desenvolvimento deste trabalho;

A CAPES e a PUC-Rio pelo suporte financeiro através de bolsas concedidas.

Resumo

Ribeiro, Laercio Costa; Anda, Enrique Victoriano. **Efeitos de Muitos Corpos nas Propriedades de Transporte em Sistemas Nanoscópicos. Efeito Kondo e Magnetismo em Estruturas de Pontos Quânticos.** Rio de Janeiro, 2010. 151p. Tese de Doutorado — Departamento de Física, Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro.

Nesta tese estudamos as propriedades de transporte de estruturas de pontos quânticos (PQ's) ligados a contatos metálicos (CM). Descrevemos o formalismo dos bósons escravos através de sua aplicação ao sistema de um PQ ligado a um CM. Estudamos a nuvem Kondo (NK) dentro deste CM e desenvolvemos uma metodologia para calcular sua extensão ξ . Mostramos que ξ é inversamente proporcional a temperatura Kondo T_K . Aplicamos o método ao sistema de dois PQ's. Estudamos o Regime Kondo (RK) molecular de um elétron (1e), a concorrência entre o antiferromagnetismo e o RK de dois elétrons (2e), a constituição da NK dentro dos CM e o valor de T_k . Calculamos a extensão da NK e a TK para diferentes valores da conexão entre os PQ's e comparamos com os resultados obtidos a temperatura finita (TF). Mostramos a diminuição da NK quando TK e a conexão entre os PQ's aumentam. Obtivemos um comportamento exponencial para T_K em função desta conexão. Estudamos o sistema de dois PQ's interagentes que se "enxergam" através de um terceiro PQ não interagente. Obtivemos a coexistência entre o RK e a correlação ferro (CF) para o sistema com 2e. À TF obtivemos um comportamento parabólico para a TK em função da conexão com o sítio do meio. Estes resultados diferem dos obtidos para o sistema de dois PQ's conectados diretamente entre si. Estudamos uma molécula de três PQ's interagentes conectados a dois CM através do PQ do meio e identificamos o estabelecimento de um regime Kondo dois estágios. Observamos uma CF quando o PQ do meio está ocupado e uma correlação antiferro CAF quando está vazio. Esta propriedade permite o funcionamento deste sistema como uma porta quântica. Mostramos que a leitura da informação desta porta pode ser mediada pelo RK.

Palavras-chave

pontos quânticos; efeito Kondo; sistemas fortemente correlacionados; correlação de spin; nuvem Kondo; informação quântica; porta quântica;

Abstract

Ribeiro, Laercio Costa; Anda, Enrique Victoriano. **Many body effects and transport properties in nanoscopic systems. The Kondo effect and magnetism in quantum dot structures.** Rio de Janeiro, 2010. 151p. DSC Thesis — Departamento de Física, Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro.

In this thesis we study the transport properties of quantum dot structures (QD's) connected to metallic leads (ML). We describe the slave boson mean field approach through its application to a system of one QD connected to a (ML). We study the Kondo cloud (KC) inside this ML and develop a method to calculate its extension ξ . We prove that ξ is proportional to the inverse of Kondo temperature T_K . We apply the method to the system of two QD's and study the molecular KR for the system with one electron (1e), the competition between the antiferromagnetism and the KR for the system with an occupations of two electrons (2e), the formation of the Kondo cloud inside the ML and the T_K value. We calculate the extension ξ and T_K for different values of the connection between the QD's and compare with the results found to finite temperature (FT). We show the decrease of the KC when T_K and the connection between the dots increases. We obtain an exponential behavior of T_K as a function of this connection. We study the system of two QD's with Coulomb interaction U correlated through a non interacting QD. We obtain the coexistence between the KR and the ferromagnetic correlation (FC) for the system with 2e. In a regime of finite temperature we obtain a parabolic behavior to the T_K as a function of the connection with the central QD. This results are different of that obtained for the system of two QD's directly connected to each other. We study the molecule of three interacting QD's connected to two ML through the central one and identify a two stage Kondo effect. We observe a FC when the central QD is charged with one electron and an anti-ferromagnetic correlation (AFC) when this PQ is empty (or occupied if an even number of electrons). This properties permits the operation of this system as a quantum gate device. We prove that the reading of the information of this gate can be mediated through the KR.

Keywords

quantum dots; Kondo effect; strong correlated systems; spin correlations; Kondo cloud; quantum information; quantum gate;

Sumário

| | | |
|-----|---|------------|
| 1 | Efeito Kondo de um e dois estágios em estruturas de pontos quânticos | 19 |
| 1.1 | Introdução | 19 |
| 1.2 | Efeito Kondo em estruturas de pontos quânticos | 21 |
| 1.3 | Efeito Kondo de dois estágios | 25 |
| 1.4 | Resumo | 29 |
| 2 | Formalismo dos bósons escravos na aproximação de campo médio. Aplicação ao sistema de um PQ conectado a um contato metálico. | 30 |
| 2.1 | Ponto quântico conectado a um contato metálico | 30 |
| 2.2 | Formalismo de bósons escravos na aproximação de campo médio | 31 |
| 2.3 | Bósons escravos a temperatura finita | 36 |
| 2.4 | Resumo | 38 |
| 3 | Nuvem Kondo em estruturas de PQ's. | 40 |
| 3.1 | Introdução | 40 |
| 3.2 | Existência e extensão da nuvem Kondo | 44 |
| 3.3 | Cálculo da densidade de estados local | 45 |
| 3.4 | Outros métodos numéricos | 48 |
| 3.5 | Resultados numéricos | 52 |
| 3.6 | Conclusões | 57 |
| 4 | Efeito Kondo e a interação antiferromagnética numa molécula de dois PQ's. | 59 |
| 4.1 | Introdução | 59 |
| 4.2 | Método dos bósons escravos | 61 |
| 4.3 | Nuvem Kondo | 63 |
| 4.4 | Resultados Numéricos | 65 |
| 5 | Efeito Kondo e correlação eletrônica num sistema de três PQ's conectados em série | 85 |
| 5.1 | Introdução | 85 |
| 5.2 | Método dos bósons escravos | 86 |
| 5.3 | Funções de Green | 87 |
| 5.4 | Sistema de três PQ's(solução exata). | 89 |
| 5.5 | Resultados | 94 |
| 5.6 | Conclusões | 112 |
| 6 | Efeito Kondo e correlação eletrônica num sistema de três PQ's interagentes | 114 |
| 6.1 | Introdução | 114 |
| 6.2 | Efeito Kondo e o conceito de porta lógica | 117 |
| 6.3 | Método dos bósons escravos | 126 |
| 6.4 | Funções de Green | 129 |
| 6.5 | Resultados | 130 |

| | | |
|-----|--|------------|
| 6.6 | Conclusões | 138 |
| 7 | Conclusões e perspectivas | 139 |
| 7.1 | Molécula de dois PQ's | 140 |
| 7.2 | Molécula de três pontos quânticos | 142 |
| 7.3 | Sistema de três pontos quânticos como porta quântica | 143 |
| 7.4 | Perspectivas futuras | 144 |

Lista de figuras

- 1.1 A figura mostra em (a) o comportamento da resistividade elétrica em função da temperatura para três tipos de materiais. A curva de cor verde mostra uma queda abrupta da resistividade com a temperatura, característica do fenômeno da supercondutividade apresentado por materiais como alumínio e nióbio. A curva azul mostra uma resistividade residual a baixa temperatura proveniente de imperfeições da rede cristalina observada em alguns metais. Já a curva em vermelho é obtida para sistemas compostos por materiais metálicos dopados com impurezas magnéticas, como átomos de cobalto depositados sobre ouro ou cobre. Em (b) apresentamos um resultado obtido em uma estrutura conhecida como ponto quântico. Observamos o aumento da condutância deste dispositivo (linha vermelha) quando esta estrutura é ocupada com um número ímpar de elétrons e um decréscimo (linha azul) quando sua ocupação é par. 19
- 1.2 A figura apresenta uma estrutura de um PQ conectado a contatos metálicos. O ajuste dos potenciais elétricos aplicados a partir destes contatos permite o controle sobre os parâmetros que definem o PQ, como o número de elétrons e a magnitude das conexões do sistema. 21
- 1.3 A figura apresenta em (D) a estrutura de um PQ conectado a contatos metálicos. Em (A) temos um perfil de energia mostrando o bloqueio de Coulomb no PQ e um estado virtual que precisa ser criado para que o sistema possa conduzir no regime Kondo. Em (b) e (c) temos, respectivamente, o perfil das densidades de estados neste PQ com o sistema em equilíbrio e fora do equilíbrio termodinâmico. 22
- 1.4 A figura mostra os quatro estágios referentes ao processo de um elétron passar do reservatório da esquerda para o reservatório da direita através de um PQ sem sofrer a repulsão Coulombiana já que em momento nenhum o PQ está duplamente ocupado. Este processo caracteriza o efeito Kondo. 23
- 1.5 A figura mostra na curva de cor preta a anti-ressonância na DOS do PQ central característica do efeito Kondo de dois estágios que obtivemos no sistema de três PQ's estudado no capítulo seis. A curva de cor vermelha mostra a DOS calculadas nos PQ's laterais. 25
- 1.6 A figura mostra o sistema de dois PQ's com interação Coulombiana U conectados lateralmente a uma cadeia infinita de PQ's não interagentes. 26
- 1.7 A figura mostra em (a) a condutância calculada para três diferentes valores da conexão t'' , com $t'' < t'$ ($U = 1.0, t' = 0.3$) e em (b) a carga em cada PQ, ambos em função do potencial de porta Vg aplicado na base dos PQ's. 27

- 1.8 A figura mostra um PQ conectado a dois reservatórios de elétrons (em azul) e a um PQ maior (em vermelho). O PQ maior funciona como um reservatório finito de elétrons e tem como função a acessibilidade do regime Kondo de dois estágios pelo sistema. 28
- 2.1 A figura mostra um sistema composto por um simples PQ conectado a um contato metálico. 31
- 2.2 A figura mostra o reservatório de elétrons representado pelo contato metálico e os níveis de energia no PQ, controlados através do potencial de porta Vg_α aplicado na base do PQ. 32
- 2.3 A figura mostra os valores médios dos operadores e_α , $p_{\alpha\sigma}$ e d_α em função do potencial de porta Vg_α aplicado na base do PQ. 34
- 2.4 A figura mostra as DOS's calculadas para alguns valores do potencial de porta aplicado na base do PQ. No resultado fica evidente a natureza Kondo do sistema com a persistência dessas curvas no nível de Fermi. 34
- 2.5 A figura mostra o comportamento do fator de renormalização $\lambda_{2\sigma}^\alpha$, do nível efetivo $\tilde{\epsilon}_\alpha$ e da ocupação eletrônica no PQ em função do potencial de porta V_α aplicado na base do PQ. 36
- 2.6 A figura mostra o comportamento do parâmetro Z^2 em função da temperatura e para quatro diferentes valores da conexão t_L entre o PQ e o contato metálico. Também mostra a DOS calculada no PQ em $T = 0$ para os valores de t_L que correspondem as curvas de Z^2 . Para obtermos este resultado ajustamos em $Vg_\alpha = -U/2$ o potencial de porta aplicado na base do PQ, na posição de simetria elétron-buraco. 38
- 3.1 A figura mostra o sistema de um PQ com interação Coulombiana U conectado a um reservatório de elétrons. Na figura, evidenciamos a possibilidade de representarmos o reservatório como uma cadeia semi-infinita de PQ's não interagentes. 40
- 3.2 A figura mostra a DOS na impureza obtida para $T < T_k$ (linha vermelha) e $T > T_K$ (linha azul) da DOS em sítios no interior do reservatório. A curva em preto corresponde a uma gaussiana de mesma largura que o pico Kondo. 41
- 3.3 A figura mostra o comportamento para $T < T_k$ e $T > T_K$ da DOS nos quatro primeiros sítios de uma semi-cadeia desacoplada. 42
- 3.4 A figura mostra o comportamento para $T < T_k$ e $T > T_K$ da DOS em sítios no interior do reservatório L mostrado na figura 3.1. 43
- 3.5 A figura mostra a disposição dos sítios no interior da semi-cadeia que representa o contato metálico. Esta figura é construída de forma tal a localizar um determinado sítio N no interior desta semi-cadeia e tornar evidente que a função de Green que descreve os sítios a esquerda de N , \tilde{g}_{N+1} , é uma função de Green de uma semi-cadeia infinita, sendo igual a \tilde{g}_L . Já para os sítios a direita de N é apresentado nesta figura um processo de renormalização a partir do qual a função de Green \tilde{g}_{N-1} , que descreve esta parte do sistema. 46
- 3.6 A figura destaca, através da linha pontilhada, o aglomerado de PQ's que é considerado no método do aglomerado embebido(ECA). 48

- 3.7 A figura mostra a função $F(N)$, calculada utilizando ECA para diferentes tamanhos L do aglomerado. Os parâmetros utilizados são $U = t$ e $\Gamma = 0.1t$. Nesta figura a curva vermelha apresenta uma extrapolação de $F(N)$ para o limite termodinâmico. 53
- 3.8 A figura mostra a uma extrapolação de R_k ao regime termodinâmico quando o comprimento L do aglomerado tende a infinito. 53
- 3.9 A figura mostra a função $F(N)$ para diferentes valores da constante de acoplamento Γ . Em (a) temos a extrapolação de $F(N)$ ao limite termodinâmico para cada valor de Γ e em (b) temos os resultados obtidos com o método dos bósons escravos. 54
- 3.10 A figura mostra, para os três métodos discutidos, o comprimento R_k da nuvem Kondo em função da largura Δ do pico Kondo no nível de Fermi. 55
- 3.11 A figura mostra o comprimento da nuvem Kondo em função de $1/\Delta(T_k)$ para três diferentes valores U da interação Coulombiana na impureza. 56
- 3.12 A figura mostra o parâmetro A_0 em função de Δ calculado com os bósons escravos e com ECA. Diferentes valores de U foram utilizados com ECA. Observamos que, quando Δ é pequeno, todas as curvas coincidem, como esperado, se pensarmos em termos do caráter universal que caracteriza o efeito Kondo. Aumentando Δ entramos num regime de flutuação de valência e as curvas para diferentes valores de U começam a divergir. 57
- 4.1 A figura mostra uma molécula artificial constituída por uma estrutura de dois PQ's conectados a dois reservatórios de elétrons. 59
- 4.2 A figura mostra o comportamento do estado renormalizado $\tilde{\epsilon}_{\alpha(\beta)}$ dos PQ's interagentes em função do potencial de porta aplicado na base do PQ central para diferentes valores da conexão t_0 entre os PQ's. 66
- 4.3 A figura mostra o comportamento da condutância em função do potencial de porta aplicado na base dos PQ's α e β para diferentes valores da conexão $t_{\alpha\beta}$ entre estes PQ's. 67
- 4.4 A figura mostra o comportamento do parâmetro Z^2 responsável por renormalizar as conexões com os reservatórios e entre os PQ's para diferentes valores da conexão $t_{\alpha\beta}$ entre os PQ's. 68
- 4.5 A figura mostra a carga por spin calculada no pq $\alpha(\beta)$ em função do potencial de porta $Vg_{\alpha(\beta)}$ aplicado na base desses PQ's para quatro diferentes conexões $t_{\alpha\beta}$. 69
- 4.6 A figura mostra um sistema de dois PQ's com interação Coulombiana U e conectados entre si através $t_{\alpha\beta}$. 71
- 4.7 A figura mostra um perfil para a energia total do sistema em função do nível local ϵ_0 dos PQ's e destaca a existência de três regiões no espaço de ϵ_0 , que correspondem a valores de ϵ_0 para os quais o sistema se encontra ocupado com um, dois e três elétrons. Nas regiões em vermelho, de um ou três elétrons, o sistema de dois PQ's se apresenta num estado Kondo molecular. Já na região em amarelo, de dois elétrons, observamos o sistema num estado antiferro. 72

- 4.8 A figura mostra o comportamento das regiões de fronteira do regime Kondo molecular em função da conexão $t_{\alpha\beta}$ entre os PQ's. Estas regiões estão indicadas no diagrama da figura 4.7 e correspondem as bordas da região em vermelho destacada neste diagrama. No caso, a curva preta descreve a transição entre os regimes de $N = 0$ a $N = 1$ elétrons. Já a curva vermelha descreve a transição de $N = 1$ a $N = 2$ elétrons, na qual o sistema passa do regime Kondo molecular a um regime de interação anti-ferro entre os spins nos PQ's concorrendo com o regime Kondo. 74
- 4.9 A figura mostra as transições características do regime Kondo de dois canais instalado no sistema de PQ's. 75
- 4.10 A figura mostra o efeito provocado pela presença da impureza $\alpha(\beta)$ na DOS calculada no interior do reservatório L(R). A curva preta mostra esta DOS para o sítio $N = 50$ no interior do reservatório isolado. A curva em vermelho mostra a DOS calculada neste sítio quando consideramos a conexão de cada PQ com seu respectivo reservatório. Já a curva em azul mostra a DOS no PQ $\alpha(\beta)$, que utilizamos para restringir nossa análise a região próxima ao nível de Fermi. 78
- 4.11 A figura mostra o efeito da interação anti-ferro entre os PQ's na DOS calculada no sítio $N = 50$ dentro dos reservatórios. A curva preta mostra a DOS calculada neste sítio para o caso em que $t_{\alpha\beta} = 0$. As curvas em vermelho, azul e cinza, são obtidas para $t_{\alpha\beta} = 0.03$, $t_{\alpha\beta} = 0.06$ e $t_{\alpha\beta} = 0.09$, respectivamente. Já a curva em rosa tracejada corresponde ao resultado da DOS para o reservatório isolado. 79
- 4.12 A figura mostra as retas que tangenciam a função $\ln F(N)$ para diferentes valores da conexão $t_{\alpha\beta}$ entre os PQ's. A inclinação dessas retas nos fornece a temperatura Kondo do sistema para estas conexões. 80
- 4.13 A figura mostra o comportamento do parâmetro de renormalização Z^2 em função da temperatura para o sistema de dois PQ's com diferentes valores da conexão $t_{\alpha\beta}$ entre os PQ's. 81
- 4.14 A figura mostra uma comparação entre a temperatura Kondo obtida a partir da inclinação das retas tangentes a $\ln F(N)$ e a temperatura T para a qual o parâmetro $Z^2 \rightarrow 0$ e o sistema é desacoplado dos reservatórios. 82
- 4.15 A figura mostra uma curva universal obtida para o logarítmo da função $F(N)$. Esta curva nos revela, de certa forma, o caráter universal da física do sistema associada ao efeito Kondo. 82
- 5.1 A figura mostra uma molécula artificial que consiste de dois PQ's, α e β , conectados a contatos metálicos e indiretamente ligados entre si através de suas respectivas conexões com um terceiro PQ 0. 85
- 5.2 A figura mostra o sistema de três PQ's isolados com os PQ's interagentes α e β conectados em série ao PQ 0 não interagente. 89

- 5.3 A figura mostra, para quatro diferentes valores de t_0 , as energias associadas as soluções ferro e anti-ferro que obtivemos de forma exata através da diagonalização do Hamiltoniano com duas e três partículas. Para este resultado o sistema foi preparado com o potencial de porta $Vg_{\alpha(\beta)}$ dos PQ's laterais fixado em $-U/2$, onde $U=0.5$, e as energias foram avaliadas em função do potencial Vg_0 aplicado na base do PQ central. 93
- 5.4 A figura mostra o comportamento do estado renormalizado $\tilde{\epsilon}_{\alpha(\beta)}$ dos PQ's interagentes em função do potencial de porta aplicado na base do PQ central para diferentes valores da conexão t_0 entre os PQ's. O sistema é considerado na posição de simetria partícula-buraco, com $\epsilon_{\alpha(\beta)} = -U/2$. 95
- 5.5 A figura mostra a correlação de spin entre as diferentes partes do sistema de três PQ's que estamos tratando neste capítulo. 96
- 5.6 A figura mostra o estado de carga do PQ central calculado em função do potencial de porta aplicado na base desse PQ e para diferentes valores da conexão t_0 entre os PQ's. O sistema é considerado na posição de simetria partícula-buraco, com $\epsilon_{\alpha(\beta)} = -U/2$. 96
- 5.7 A figura mostra o comportamento do estado renormalizado $\epsilon_{\alpha(\beta)}$ em função do potencial de porta $Vg_{\alpha(\beta)}$ no PQ $\alpha(\beta)$ para o sistema com o nível de energia ϵ_0 do PQ central ajustado em três diferentes posições. Cada quadrante corresponde a um valor adotado para a conexão t_0 com esse PQ, sendo $t_0 = 0.1, 0.2, 0.3$ e 0.4 . Para esses quatro valores de t_0 o potencial de porta Vg_0 aplicado ao PQ central é ajustado dentro das regiões de dois, três e quatro elétrons. Na região de três elétrons este potencial é ajustado em $Vg_0 = 0$ e nas regiões de dois e quatro elétrons próximo a fronteira com a região de três elétrons. 97
- 5.8 A figura mostra o comportamento do parâmetro Z^2 em função do potencial de porta Vg_0 aplicado na base do PQ central para diferentes valores da conexão t_0 entre os PQ's. O sistema é considerado na posição de simetria partícula-buraco, com $\epsilon_{\alpha(\beta)} = -U/2$. 99
- 5.9 A figura mostra o comportamento da condutância em função do potencial de porta aplicado na base do PQ central para diferentes valores da conexão t_0 entre os PQ's. O sistema é considerado na posição de simetria partícula-buraco, com $\epsilon_{\alpha(\beta)} = -U/2$. 100
- 5.10 A figura mostra o comportamento do parâmetro $1 - Z^2$ em função da conexão t_0 para diferentes posições do nível local ϵ_0 do PQ central. Para este resultado os níveis de energia dos PQ's laterais são colocados em $\epsilon_{\alpha(\beta)} = -U/2$. 101
- 5.11 A figura mostra o comportamento dos níveis renormalizados $\tilde{\epsilon}_{\alpha(\beta)}$ dos PQ's laterais em função da conexão t_0 para diferentes posições do nível local ϵ_0 do PQ central. Para este resultado os níveis de energia dos PQ's laterais são colocados em $\epsilon_{\alpha(\beta)} = -U/2$. 102

- 5.12 A figura mostra o comportamento do estado renormalizado $\tilde{\epsilon}_{\alpha(\beta)}$ dos PQ's interagentes em função do potencial de porta aplicado na base destes PQ's e para diferentes valores da conexão t_0 . O nível de energia do PQ central é colocado em zero e, como podemos observar, o sistema apresenta simetria partícula buraco em torno de $\epsilon_{\alpha(\beta)} = -U/2$. O resultado é praticamente independente do valor de t_0 . 103
- 5.13 A figura mostra a condutância em função do potencial de porta aplicado na base dos PQ's interagentes $\alpha(\beta)$ e para diferentes valores da conexão t_0 . O nível de energia do PQ central é colocado em zero e, como podemos observar, o sistema apresenta simetria partícula buraco em torno de $\epsilon_{\alpha(\beta)} = -U/2$. 104
- 5.14 A figura mostra o comportamento da DOS local nos PQ's interagentes α e β com o aumento na magnitude da conexão t_0 com o PQ central 0. Para este resultado os níveis de energia dos PQ's laterais são colocados em $\epsilon_{\alpha(\beta)} = -U/2$. 105
- 5.15 A figura mostra o comportamento do parâmetro Z^2 em função do potencial de porta aplicado na base dos PQ's interagentes $\alpha(\beta)$ e para diferentes valores da conexão t_0 . O nível de energia do PQ central é colocado em zero e, como podemos observar, o sistema apresenta simetria partícula buraco em torno de $\epsilon_{\alpha(\beta)} = -U/2$. 105
- 5.16 A figura mostra os níveis de energia associados aos estados Φ_1 , Φ_2 e Φ_3 que constituem a base que renormaliza o sistema de três PQ's. 106
- 5.17 A figura mostra o efeito provocado na DOS dos sítios $N = 51$ e $N = 52$ dentro dos reservatórios pelo processo de formação do estado ferromagnético com o aumento na magnitude da conexão t_0 entre os PQ's. Os dois gráficos mostram a ressonância e a anti-ressonância observada na DOS próxima ao nível de Fermi quando N é ímpar ou par, respectivamente. Em ambos os gráficos a curva preta tracejada representa a DOS para o sistema com $t_0 = 0$ e a curva rosa pontilhada a DOS considerando os reservatórios isolados ($t_{L(R)} = 0$). Já as curvas vermelha, azul e cinza são obtidas para $t_0 = 0.02$, $t_0 = 0.04$ e $t_0 = 0.08$, respectivamente. O sistema foi considerado na posição de simetria partícula-buraco, com $\epsilon_{\alpha(\beta)} = -U/2$ nos PQ's interagentes e $\epsilon_0 = 0$ no PQ central. 108
- 5.18 A figura mostra as retas tangentes as curvas de $\ln F(N)$ no limite assintótico para diferentes valores da conexão t_0 com o PQ central. Este resultado foi obtido para o sistema na posição de simetria partícula-buraco, com $\epsilon_{\alpha(\beta)} = -U/2$ nos PQ's laterais e $\epsilon_0 = 0$ no PQ central. 110
- 5.19 A figura mostra o inverso da extensão ξ_i da nuvem Kondo em função da conexão t_0 entre os PQ's. Este resultado foi obtido para o sistema na posição de simetria partícula-buraco, com $\epsilon_{\alpha(\beta)} = -U/2$ nos PQ's laterais e $\epsilon_0 = 0$ no PQ central. 110

- 5.20 A figura mostra o comportamento do parâmetro Z^2 em função da temperatura T para $t_0 = 0.01; 0.02; 0.03; \dots; 0.30$ entre os PQ's. Este resultado foi obtido para o sistema na posição de simetria partícula buraco, com $\epsilon_{\alpha(\beta)} = -U/2$ nos PQ's laterais e $\epsilon_0 = 0$ no PQ central. 111
- 5.21 A figura mostra a temperatura Kondo T_k do sistema em função da conexão t_0 entre os PQ's. Este resultado foi obtido para o sistema na posição de simetria partícula-buraco, com $\tilde{\epsilon}_{\alpha(\beta)} = -U/2$ nos PQ's laterais e $\epsilon_0 = 0$ no PQ central. 113
- 6.1 A figura mostra em (A) a molécula real polyoxometalate proposta por D.Loss e em (B) uma representação dessa molécula conectada a dois reservatórios de elétrons através do PQ central. Nessa estrutura estudamos a correlação entre os spins S_L e S_R em função da ocupação do PQ central, cujo spin total é representamos por S_c . 114
- 6.2 A figura mostra uma molécula artificial composta por três PQ's interagentes. O PQ 0 se conecta aos eletrodos L e R, bem como aos demais PQ's, α e β , formando a estrutura de PQ's apresentada. 115
- 6.3 Os resultados apresentados a esquerda da figura mostram a condutância (linha contínua) e a carga no PQ central (linha tracejada). No lado direito os gráficos mostram as correlações de spin entre as diferentes partes do sistema, sendo $S_\alpha S_\beta$ representado pela linha tracejada, $S_L S_0$ pelas linhas circulares e $S_{\alpha(\beta)} S_0$ pela linha contínua. Os resultados (a) e (b) correspondem a $t_{\alpha(\beta)} = 0.4$, (b) e (e) a $t_{\alpha(\beta)} = 0.2$ e (c) e (f) a $t_{\alpha(\beta)} = 0.05$. $J = 0$, $U = 2$ e $t_{L(R)} = 0.3$. 116
- 6.4 A figura mostra as soluções ferro e antiferro para o sistema de três PQ's isolados. Em (A) o sistema é ocupado com dois elétrons e em (B) com três. Observamos que no primeiro caso a solução dominante é antiferro enquanto que no segundo a solução é ferro. De acordo com o resultado da figura 3 essa propriedade é mantida quando o sistema é conectado aos reservatórios. 118
- 6.5 A figura apresenta um esquema mostrando as escalas de tempo envolvidas no processo de operação no modelo de porta quântica que estamos propondo. 122
- 6.6 A figura mostra em (a) a incompatibilidade do efeito Kondo com a interação ferro e em (b) a compatibilidade desse efeito com a interação anti-ferro. 123
- 6.7 A figura mostra em (a) a condutância (linha contínua) e a carga no PQ central (linha tracejada), em (b) a correlações de spin $S_\alpha S_0$ (linha contínua), $S_L S_0$ (linha com círculos) e $S_u^z S_L^z$ (linha tracejadas), e em (c) a DOS local no PQ central (linha de cor preta) e nos PQ's laterais (linha de cor vermelha). Estes resultados correspondem a $t_{\alpha(\beta)} = 0.4$, $J = 0.4$, $U = 2$ e $t_{L(R)} = 0.3$. 124
- 6.8 A figura apresenta as DOS's calculadas no PQ central para diferentes valores das conexões com os PQ's laterais. O resultado é obtido em $T=0$ e com o potencial de porta nos PQ's ajustado na posição de simetria $Vg_i = -U/2$, com $i = 0, \alpha, \beta$ e $U = 0.65$. 131

- 6.9 A figura apresenta a DOS calculada no PQ central para diferentes valores de temperatura. O potencial de porta aplicado nos PQ's foram ajustado na posição de simetria $Vg_i = -U/2$, com $i = 0, \alpha, \beta$ e $U = 0.65$. 131
- 6.10 A figura apresenta a DOS calculada no PQ central para diferentes valores de temperatura. O potencial de porta aplicado nos PQ's foram ajustados de forma que $e_\alpha = e_\beta = -0.1$ e $e_0 = -0.325$, dessa vez fora da região de simetria partícula buraco. 132
- 6.11 A figura mostra o comportamento com a temperatura do parâmetro ZZ_0 introduzido no contexto do formalismo dos bósons escravos e que é responsável por renormalizar a conexão com os PQ's laterais. Esse parâmetro é estudado com o sistema em diferentes regimes, definidos pela magnitude da conexão $t_{\alpha(\beta)}$. 133
- 6.12 A figura mostra para diferentes temperaturas o comportamento de Z_0 em função do potencial de porta aplicado ao PQ central. Esse parâmetro é responsável por renormalizar a conexão do PQ central com os reservatórios. Este resultado é obtido com os potenciais de porta dos PQ's externos ajustados em $-U/2$, com $U = 0.65$. 134
- 6.13 A figura mostra para diferentes temperaturas o comportamento de ZZ_0 em função do potencial de porta aplicado ao PQ central. Esse parâmetro é responsável por renormalizar a conexão entre o PQ central e os PQ's laterais. Este resultado é obtido com os potenciais de porta dos PQ's externos ajustados em $-U/2$, com $U = 0.65$. 134
- 6.14 A figura mostra para diferentes valores de temperatura o comportamento da condutância em função do potencial de porta aplicado na base do PQ central. Esse resultado é obtido com os potenciais de porta ajustados $-U/2$, com $U = -0.65$, de forma a deixar o sistema na posição de simetria partícula buraco. 135
- 6.15 A figura mostra a variação com a temperatura da densidade de estados no PQ's $0, \alpha$ e β calculada para o sistema em dois regimes diferentes. Em (A) o sistema apresenta uma anti-ressonância na DOS do PQ 0 caracterizando um efeito Kondo de dois estágios enquanto que em (B) o sistema apresenta dois picos que caracterizam o estado molecular. Vimos em (A) que o aumento da temperatura é responsável por recompor o buraco na DOS do PQ central, destruindo a anti-ressonância característica do efeito Kondo de dois estágios e provocando uma transição isolante-metal no regime do sistema. Em (B) vimos que, no regime molecular, o sistema permanece completamente insensível com o aumento da temperatura. 136
- 7.1 A figura mostra o comportamento oscilatório da interação RKKY em função do número N de sítios não interagentes da cadeia de PQ's colocada entre α e β . Este resultado foi obtido com $K_f = \pi/2$, valor que corresponde ao sistema com o nível de Fermi em zero. 144

7.2 A figura mostra o comportamento do nível renormalizado $\tilde{\epsilon}_{\alpha(\beta)}$ em função do potencial de porta $Vg_{\alpha(\beta)}$ aplicado na base dos PQ's interagentes para o sistema com uma cadeia central de quatro diferentes tamanhos. Para os quadros (A), (B), (C) e (D) o comprimento da cadeia central e de $N = 1$, $N = 2$, $N = 3$ e $N = 4$, respectivamente. Em (A) e (C) o alinhamento entre os spins de α e β é ferro enquanto que em (B) e (D) é antiferro.

"Science, my lad, is made up of mistakes, but they are mistakes which it is useful to make, because they lead little by little to the truth."

Julio Verne

1

Efeito Kondo de um e dois estágios em estruturas de pontos quânticos

1.1

Introdução

Ao estudarmos o comportamento de certos compostos com a diminuição da temperatura observamos que, ao invés de continuar baixando e saturar num determinado valor, ou mesmo cair abruptamente a zero como no caso de materiais supercondutores, a resistividade elétrica volta a subir depois que a temperatura atinge um determinado valor característico T_K . No caso,

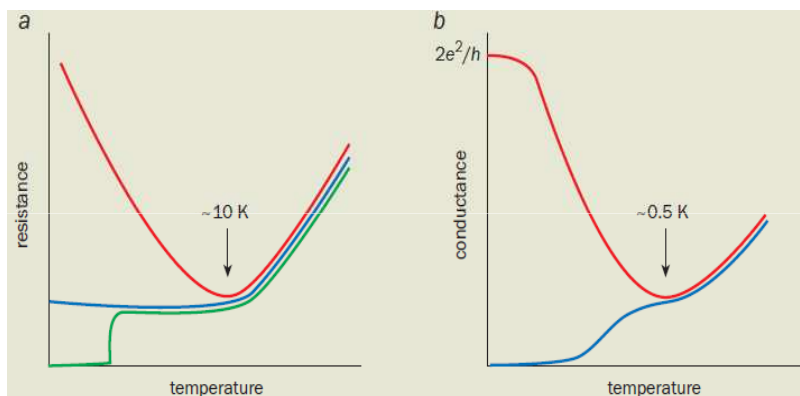


Figura 1.1: A figura mostra em (a) o comportamento da resistividade elétrica em função da temperatura para três tipos de materiais. A curva de cor verde mostra uma queda abrupta da resistividade com a temperatura, característica do fenômeno da supercondutividade apresentado por materiais como alumínio e nióbio. A curva azul mostra uma resistividade residual a baixa temperatura proveniente de imperfeições da rede cristalina observada em alguns metais. Já a curva em vermelho é obtida para sistemas compostos por materiais metálicos dopados com impurezas magnéticas, como átomos de cobalto depositados sobre ouro ou cobre. Em (b) apresentamos um resultado obtido em uma estrutura conhecida como ponto quântico. Observamos o aumento da condutância deste dispositivo (linha vermelha) quando esta estrutura é ocupada com um número ímpar de elétrons e um decréscimo (linha azul) quando sua ocupação é par.

esperaríamos que o decréscimo da temperatura diminuísse as vibrações da rede cristalina até que a resistência atingisse um valor residual proveniente das imperfeições em sua própria estrutura.

A curva em azul na parte (a) da figura 1.1, obtida para uma amostra metálica, descreve perfeitamente esse tipo de comportamento (10). Nesta parte da figura, observamos na curva verde a queda abrupta da resistência, característica de um supercondutor. Na curva em vermelho observamos o comportamento anômalo apresentado pelos compostos a que estamos nos referindo. Na parte (b) da figura mostramos este comportamento numa estrutura artificial conhecida como ponto quântico. Em geral, quando essa estrutura é ocupada com um número ímpar de elétrons, ela passa a descrever o sistema de uma impureza magnética depositada sobre uma matriz metálica. Observamos neste caso um aumento na condutância do dispositivo (linha vermelha) a baixas temperaturas. Este comportamento está associado ao acoplamento anti-ferro entre o elétron do PQ e os elétrons do metal que cria um canal de condução e aumenta a condutância do dispositivo. No caso do sistema de impurezas magnéticas depositadas este acoplamento se reflete no aumento da resistividade do material. Este comportamento recebe o nome de efeito Kondo, em homenagem ao físico japonês Jun Kondo que em 1964 explicou o processo através do qual a resistência do material aumenta após ele atingir uma determinada temperatura T_k , conhecida como temperatura Kondo. A linha azul nesta parte da figura mostra a condutância para o PQ com um número par de elétrons. Neste caso, com todos os seus spins emparelhados, o PQ perde suas propriedades magnéticas e deixa de se acoplar com os elétrons de condução e formar o estado singleto responsável pela criação do canal que viabiliza o transporte de elétrons através do dispositivo. Como consequência, a condutância vai a zero a baixas temperaturas.

Em uma estrutura metálica dopada com impurezas magnéticas como, por exemplo, no sistema constituído por átomos de cobalto Co diluídos numa matriz de cobre $Cu(9)$, o spin não emparelhado das impurezas se acopla antiferromagneticamente com o spin dos elétrons livres da matriz metálica. Num regime de baixas temperaturas ($T < T_K$), este acoplamento é responsável por blindar o spin das impurezas, como consequência da formação de estados emaranhados singleto entre os spins destas com os spins dos elétrons na base metálica. A participação de elétrons originalmente responsáveis pela condução de corrente elétrica na formação destes estados singleto explica a diminuição da condutividade e o consequente aumento da resistividade do material. Se, por outro lado, a temperatura for aumentada a um valor maior do que a energia dos estados de muitos corpos, caracterizados pelas correlações anti-ferro entre

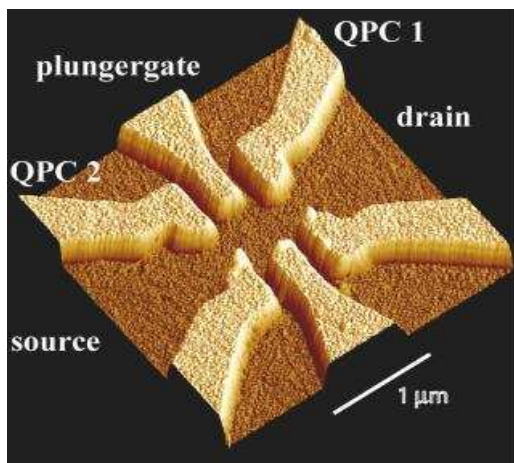


Figura 1.2: A figura apresenta uma estrutura de um PQ conectado a contatos metálicos. O ajuste dos potenciais elétricos aplicados a partir destes contatos permite o controle sobre os parâmetros que definem o PQ, como o número de elétrons e a magnitude das conexões do sistema.

o spin da impureza e os spins dos elétrons de condução, que caracterizam a temperatura Kondo T_k do sistema, outros estados são excitados sem essas correlações e a resistividade elétrica do material diminui consideravelmente.

1.2 Efeito Kondo em estruturas de pontos quânticos

Embora a natureza dos processos físicos subjacentes ao efeito Kondo já tenha sido bastante discutida nos últimos cinquenta anos o interesse em seu estudo foi reforçado pelo fato de estar presente e ser fundamental para o entendimento das propriedades eletrônicas e de transporte de vários tipos de materiais. De fato, o avanço na área de nanotecnologia conseguido nos últimos anos possibilitou a fabricação de dispositivos nanométricos conhecidos como transistores de um elétron ou, simplesmente, pontos quânticos(PQ's) (3, 5, 6, 7). Esses PQ's são constituídos por uma pequena ilha de elétrons conectada a eletrodos metálicos. Quando ocupados com um número ímpar de elétrons ¹, de modo que pelo menos um deles esteja não emparelhado, o comportamento do PQ se assemelha bastante ao de uma impureza magnética depositada sobre uma matriz metálica, no caso constituída pelos contatos.

Propriedades referentes a estrutura do PQ como o número de elétrons, a diferença de energia entre o estado localizado e o nível de Fermi e a magnitude das conexões com os contatos podem ser manipuladas através do

¹Algumas variantes do efeito Kondo, como o efeito Kondo de dois estágios, com um ou dois canais, também são observadas em pontos quânticos ocupados com um número par de elétrons.

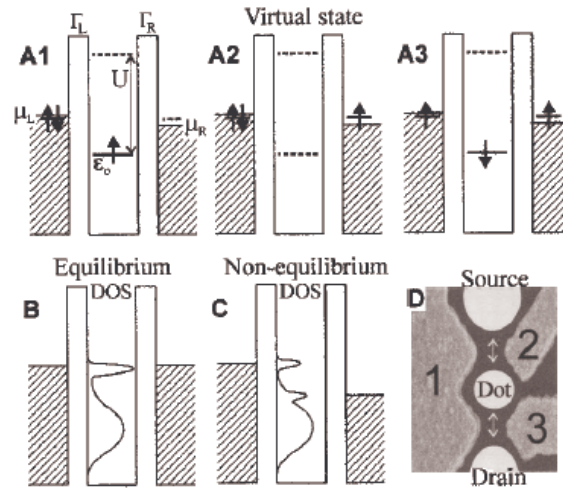


Figura 1.3: A figura apresenta em (D) a estrutura de um PQ conectado a contatos metálicos. Em (A) temos um perfil de energia mostrando o bloqueio de Coulomb no PQ e um estado virtual que precisa ser criado para que o sistema possa conduzir no regime Kondo. Em (b) e (c) temos, respectivamente, o perfil das densidades de estados neste PQ com o sistema em equilíbrio e fora do equilíbrio termodinâmico.

ajuste de potenciais aplicados em regiões específicas da estrutura. O alto grau de manipulação dos parâmetros que definem esses dispositivos nos permite trabalhar em regimes inacessíveis à sistemas convencionais, como no caso de estruturas metálicas dopadas, e abre um vasto caminho para se estudar os fenômenos relacionados ao transporte de elétrons através de nanoestruturas, inclusive os associados ao regime Kondo (11, 13, 14).

O regime Kondo em estruturas de PQ's é proveniente do acoplamento anti-ferro entre o spin de um elétron localizado no PQ e o spin dos elétrons de condução nos reservatórios. A escala de energia associada a esse acoplamento, no caso a temperatura Kondo T_k (44), depende de alguns parâmetros que definem o PQ e pode ser escrita como

$$T_k = \sqrt{\Gamma U} e^{-\frac{\epsilon(\epsilon+U)\pi}{\Gamma U}}, \quad (1-1)$$

onde U é a interação Coulombiana no interior do PQ, Γ é a constante de acoplamento entre o PQ e os contatos e ϵ é a energia do estado local no PQ (10). O controle de Γ , U e ϵ pela aplicação de potenciais através de eletrodos metálicos, como mostrado na parte D da figura 1.3, permite o ajuste no valor da temperatura Kondo T_K e o estabelecimento do regime Kondo no sistema. Nessa figura o eletrodo 1 é colocado na base do PQ com a finalidade de ajustar a posição do estado de energia local em relação ao nível de Fermi através de um potencial aplicado e, com isso, controlar o número de elétrons no PQ.

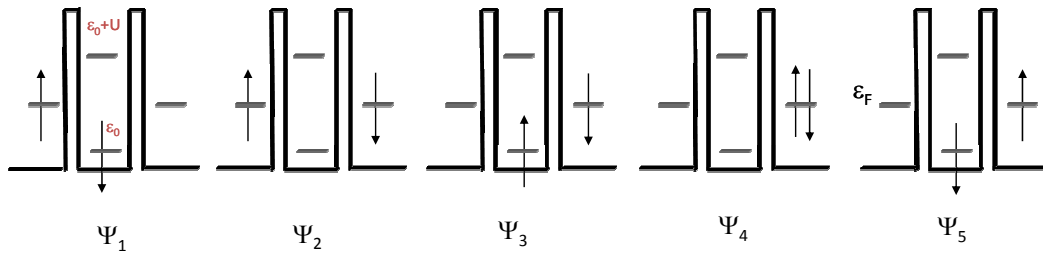


Figura 1.4: A figura mostra os quatro estágios referentes ao processo de um elétron passar do reservatório da esquerda para o reservatório da direita através de um PQ sem sofrer a repulsão Coulombiana já que em momento nenhum o PQ está duplamente ocupado. Este processo caracteriza o efeito Kondo.

Observamos, portanto, que o desenvolvimento de técnicas que permitem a fabricação de PQ's em dimensões reduzidas, assim como a manipulação de potenciais aplicados a essas estruturas, são de fundamental importância para o estudo de fenômenos relacionados ao efeito Kondo em temperaturas acessíveis no laboratório.

Para entender o mecanismo de transporte através de um PQ, em especial a forma com que o regime Kondo é estabelecido no sistema, utilizamos o modelo de Anderson ²(38). Este modelo foi introduzido inicialmente para investigar as condições necessárias ao aparecimento de momentos magnéticos em metais, mas acabou tendo como sua maior aplicação a descrição física de fenômenos associados ao transporte de elétrons em nanoestruturas como no caso de um PQ. Neste modelo a impureza é representada por um estado local ϵ , que pode ser ocupado com zero, um, ou dois elétrons. As conexões são representadas por barreiras de potencial e os contatos metálicos por reservatórios de elétrons. Considerando uma diferença de potencial infinitesimal entre os contatos podemos calcular a condutância e, com isso, estudar o transporte de elétrons através do sistema. Também nesse caso o efeito Kondo desempenha um papel central nas propriedades de transporte. Isto é consequência de sua presença estar associada a existência de estados no nível de Fermi que criam um canal de propagação entre os reservatórios. Para o sistema conduzir é necessário que um segundo elétron, proveniente do reservatório da esquerda,

²Ver equação 2.1 do próximo capítulo.

entre no PQ e, em seguida, tunele para o reservatório da direita sem alterar a energia do sistema. Entretanto, observamos no diagrama na parte (A) da figura 1.3 que a entrada de um segundo elétron no PQ está associada a um acréscimo de energia de $U = e^2/C$, onde C é a capacitância do PQ. Como $\epsilon_0 + U$ está por cima do nível de Fermi fica proibido o transporte de elétrons através do sistema, produzindo assim o chamado bloqueio de Coulomb(8).

Para um elétron tunelar de um reservatório a outro seria necessário um processo de quarta ordem em teoria de perturbação, em que os estados intermediários não implicassem em energias da ordem de U , já que estas produziriam o bloqueio de Coulomb no PQ. Na figura 1.4 apresentamos este processo e observamos a criação dos estados virtuais ψ_2 , ψ_3 e ψ_4 na transição de um estado ψ_1 para outro de mesma energia ψ_5 . Analisando esse diagrama observamos que o processo permite a passagem de um elétron de um reservatório a outro sem nenhum estado intermediário de dupla ocupação que teria implicado em uma energia adicional U , com o conseqüente bloqueio de Coulomb. Este é um processo de quarta ordem em teoria de perturbações que está associado ao efeito Kondo.

Na parte (B) da figura 1.3 observamos que a existência do estado singleto que resulta do acoplamento entre o spin de um elétron na impureza e o spin de um elétron de condução produz um pico na densidade de estados no nível de Fermi, que chamamos de pico Kondo. Em (C) apresentamos a densidade de estados calculada para o sistema fora do equilíbrio termodinâmico, com uma diferença de potencial finita $V = \mu_L - \mu_R$ entre os reservatórios, onde $\mu_{L(R)}$ correspondem aos níveis de Fermi. Observamos neste caso que o pico Kondo se divide em dois, localizados nos níveis de Fermi de cada um dos reservatórios. Esta situação fora de equilíbrio não será discutida nesta tese.

O processo perturbativo de quarta ordem como o indicado na figura 1.4 tem como estado virtual intermediário o estado ψ_A de spin total $S = 0$. Para que os elementos de matriz sejam diferentes de zero, como o Hamiltoniano conserva o spin, o estado inicial ψ_1 e final ψ_5 correspondem a singleto. São estes estados singleto, que permitem a passagem dos elétrons sem sofrer a repulsão Coulombiana fazendo o transporte de carga possível. Eles descrevem uma correlação anti-ferro entre o spin da impureza e os spins de condução característica do efeito Kondo.

Utilizamos até agora um dispositivo que consiste de um PQ com spin total 1/2 conectado a dois eletrodos metálicos para simular o sistema de impurezas magnéticas depositadas sobre uma matriz metálica. Neste sistema investigamos a formação de um estado singleto de muitos corpos, como resultado do acoplamento do spin da impureza com os spins de condução

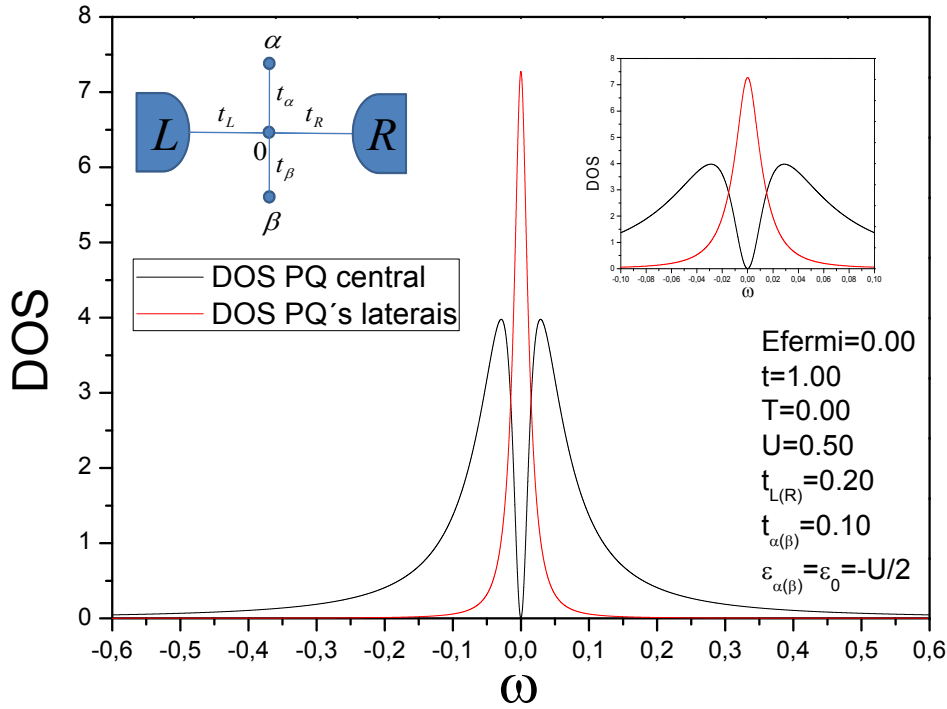


Figura 1.5: A figura mostra na curva de cor preta a anti-ressonância na DOS do PQ central característica do efeito Kondo de dois estágios que obtivemos no sistema de três PQ's estudado no capítulo seis. A curva de cor vermelha mostra a DOS calculadas nos PQ's laterais.

nos reservatórios de elétrons. No contexto da teoria de Landau, segundo a qual os reservatórios podem ser considerados como um mar de elétrons não interagentes, a que chamamos de líquido de Fermi, a formação deste estado de muitos corpos está associada a criação de uma quase-partícula cujas propriedades, como massa e energia, são renormalizadas de modo a incorporar todas as interações eletrônicas existentes no sistema. No modelo de líquido de Fermi o estudo a baixas temperaturas das interações existentes entre os momentos magnéticos e os elétrons livres numa estrutura metálica dopada pode ser resumido a um conjunto de quase-partículas que interagem muito fracamente. Essa simplificação não é mais válida em alguns dos efeitos mais intrigantes em física da matéria condensada, como é o caso de alguns sistemas fortemente correlacionados incluindo líquidos de Luttinger e algumas variantes do efeito Kondo (17, 18, 19, 20, 21).

1.3 Efeito Kondo de dois estágios

A alta capacidade de manipulação dos parâmetros que definem as estruturas de PQ's permite o acesso a uma variedade de regimes quânticos, a

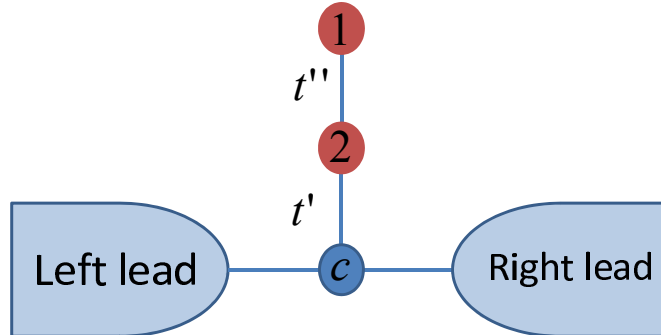


Figura 1.6: A figura mostra o sistema de dois PQ's com interação Coulombiana U conectados lateralmente a uma cadeia infinita de PQ's não interagentes.

princípio impossíveis de serem observados em sistemas de impurezas depositadas, como é o caso de algumas variações do regime Kondo, em especial do regime Kondo de dois estágios. Esse tipo de regime pode ter um ou mais canais de blindagem dependendo da topologia do sistema e do número de reservatórios conectado a cada PQ. Nosso interesse em seu estudo é justificado pelos resultados que apresentamos no capítulo seis desta tese, onde obtivemos o regime Kondo de dois estágios com um canal de blindagem no sistema de três PQ's interagentes que propomos como um dispositivo capaz de operar como uma porta lógica quântica. Nesse sistema o PQ central é conectado a dois PQ's laterais e a dois reservatórios de elétrons. Ajustando o potencial de porta dos eletrodos metálicos conseguimos controlar a ocupação e, como consequência, o spin nos PQ's. Em particular, obtivemos que o regime Kondo de dois estágios é estabelecido para uma configuração de spin $1/2$ nos PQ's e se manifesta como uma anti-ressonância na DOS do PQ central na posição do nível de Fermi como mostrado pela linha de cor preta no resultado da figura 1.5. As larguras da DOS do pico central e da anti-ressonância observada no nível de Fermi correspondem as duas escalas de energia que caracterizam o regime Kondo de dois estágios e que correspondem as duas temperaturas Kondo do sistema, T_{K1} e T_{K2} . Neste resultado a linha de cor vermelha representa a DOS calculada nos PQ's laterais. Maiores detalhes a respeito do regime Kondo de dois estágios que obtivemos no sistema de três PQ's, como os efeitos da temperatura e da variação do potencial elétrico na base dos PQ's, serão discutidos no referido capítulo da tese.

O efeito Kondo de dois estágios com um canal de blindagem também

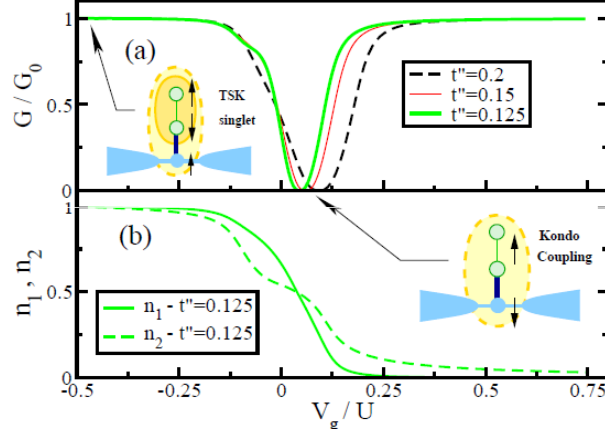


Figura 1.7: A figura mostra em (a) a condutância calculada para três diferentes valores da conexão t'' , com $t'' < t'$ ($U = 1.0, t' = 0.3$) e em (b) a carga em cada PQ, ambos em função do potencial de porta Vg aplicado na base dos PQ's.

foi abordado no trabalho de Anda et. all (17) em que os autores utilizaram o sistema da figura 1.6 para propor um novo método numérico, conhecido como LDECA³. Esse sistema consiste de dois PQ's interagentes conectados entre si e, lateralmente, a uma cadeia de PQ's não interagentes. O estado fundamental desse sistema é determinado pela posição do estado local dos PQ's em relação ao nível de Fermi e pela relação t''/t' , sendo t'' e t' as conexões do PQ 2 com o PQ 1 e com a cadeia infinita, respectivamente. Para $t'' \gg t'$ o sistema se apresenta num regime molecular. Nesse regime os PQ's se comportam como uma única estrutura com dois níveis bastante afastados. Em função do potencial de porta Vg o regime Kondo de um estágio é acessado pelo sistema para os valores em que esses níveis se alinham na posição do nível de Fermi, onde a condutância do sistema cai a zero devido a interferência criada pelo aparecimento de um caminho alternativo para a condução. Fora dessa posição os elétrons ficam impedidos de acessar os PQ's laterais e o sistema volta a conduzir. Para $t'' \ll t'$ o sistema apresenta um regime Kondo de dois estágios, caracterizado por uma nova escala de energia T_0 associada ao PQ 1, muito menor que a temperatura Kondo do sistema T_K associada ao PQ 2. Num estudo em função de Vg o regime Kondo de um estágio é acessado para valores desse potencial ligeiramente acima do nível de Fermi, onde $n_1 + n_2 = 1$, sendo $n_i (i = 1, 2)$ a ocupação do i -ésimo PQ. Esse estado

³Logarithm Discretization Embedded Cluster Approximation.

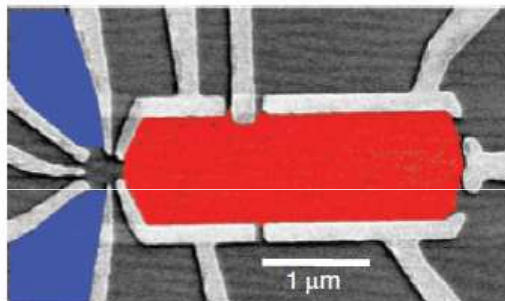


Figura 1.8: A figura mostra um PQ conectado a dois reservatórios de elétrons (em azul) e a um PQ maior (em vermelho). O PQ maior funciona como um reservatório finito de elétrons e tem como função a acessibilidade do regime Kondo de dois estágios pelo sistema.

é representado pela região destacada em amarelo claro na parte (b) da figura 1.7 e corresponde ao acoplamento anti-ferro entre o spin do elétron presente nos PQ's e os spins dos elétrons de condução na cadeia infinita. Na parte (a) da figura observamos que a condutância cai a zero devido a interferência entre os dois possíveis caminhos para a condução que aparecem no sistema com a criação do estado Kondo. Voltando a parte (b) da figura observamos uma simetria em $Vg = -U/2$, onde cada PQ é ocupado com um elétron. O estado singlete formado entre esses elétrons, representado pela região em amarelo escuro, produz em $Vg = -U/2$ uma anti-ressonância na DOS do PQ 2, semelhante a obtida pela curva em vermelho da figura 1.5, que impede o acesso de elétrons livres aos PQ's laterais. Com a ausência desse caminho alternativo a condutância no sistema é restaurada.

O problema Kondo com mais de um canal de blindagem não é obtido nos sistemas de PQ's estudados nesta tese e, por isso, será tratado de forma breve nesta parte do texto. Como uma boa referência citamos o trabalho de Potok et. all (18) em que os autores investigam o aparecimento de um efeito Kondo de dois canais no sistema apresentado na figura 1.8 e que consiste de um PQ conectado a dois reservatórios de elétrons (eletrodos em azul) e a uma estrutura maior (eletrodo em vermelho) que funciona como uma "caixa quântica" ou como um reservatório finito de elétrons. O primeiro canal de blindagem responsável por blindar o spin do PQ resulta do acoplamento anti-ferro J_{ri} com os reservatórios representados pelos eletrodos em azul

(reservatórios infinitos). O eletrodo em vermelho possui dimensões finitas de modo que, a baixas temperaturas, a entrada ou saída de elétrons fica proibida pelo bloqueio de Coulomb. Essa estrutura é construída de forma tal que o espaçamento entre os níveis de energia é bastante pequeno, o que resulta numa DOS contínua e permite a blindagem do spin do PQ através de um segundo canal, que resulta do acoplamento anti-ferro J_{rf} (reservatório finito) entre o spin do PQ e os spins dos elétrons nesse reservatório. O regime Kondo de dois estágios é acessado quando $J_{rf} = J_{ri}$. Neste caso os reservatórios independentes estão igualmente acoplados e concorrem no sentido de blindar individualmente o spin do PQ. A instabilidade criada a partir desta simetria produz um novo estado fundamental, que chamamos de estado Kondo de dois estágios, no qual o spin do PQ é apenas parcialmente blindado. Quando o PQ se acopla de forma diferente com os reservatórios ($J_{rf} > J_{ri}$ ou $J_{rf} < J_{ri}$) o sistema entra no regime Kondo de um estágio através da formação de um estado singleto com os elétrons do reservatório de maior acoplamento.

1.4

Resumo

Neste capítulo apresentamos uma introdução ao estudo do transporte eletrônico associado ao regime Kondo e a algumas de suas variações, como o regime Kondo de dois estágios, com um ou dois canais de blindagem, em estruturas de PQ's. Enfatizamos o alto grau de manipulações conseguido para os parâmetros que definem o regime quântico instalado nessas estruturas e a possibilidade de aplicações tecnológicas baseadas no controle desses regimes. Começamos com a descrição do problema original associado ao aumento da resistividade com a diminuição da temperatura, para valores baixos dessa grandeza, em sistemas metálicos dopados com impurezas magnéticas. Apresentamos a solução proposta pelo físico Japonês Jun Kondo para explicar esse fenômeno, baseada na criação de estados singleto entre os spins das impurezas e dos elétrons de condução no metal. Mostramos de que forma a instalação do regime Kondo modifica as propriedades de transporte num sistema de um PQ, possibilitando o transporte de elétrons através dessa estrutura. Por último comentamos a possibilidade de acesso a algumas variações do regime Kondo em certas estruturas de PQ's, como no sistema de dois PQ's conectados lateralmente a uma cadeia infinita estudado por Anda et. all, no sistema de um PQ conectado a dois reservatórios infinitos e a uma estrutura maior, que serve como um reservatório finito de elétrons, estudada por Potok et all e no próprio sistema de três PQ's estudado no capítulo seis desta tese.

2

Formalismo dos bósons escravos na aproximação de campo médio. Aplicação ao sistema de um PQ conectado a um contato metálico.

Neste capítulo descrevemos o método dos bósons escravos para U finito (32, 33) na aproximação de campo médio (34, 35) e apresentamos sua aplicação no tratamento do problema Kondo em sistemas de PQ's. A título de ilustração aplicamos este método a um sistema simples, composto de um PQ conectado a um contato metálico. Nesse modelo o PQ funciona como uma impureza magnética e o contato como um reservatório de elétrons, como mostrado na figura 2.1. Os elétrons se encontram fortemente co-relacionados dentro do PQ e ocupam os estados de energia ϵ_α e $\epsilon_\alpha + U$, com U representando a interação Coulombiana no interior do PQ. Conectando um segundo contato metálico na base do PQ aplicamos um potencial de porta V_g que nos permite regular a posição do estado ϵ_α em relação ao nível de Fermi e, com isso, controlar a ocupação eletrônica no PQ.

Com relação ao formalismo, além do desenvolvimento matemático, onde mostramos a forma com que os bósons são inseridos no Hamiltoniano e o papel que eles desempenham no que diz respeito a imersão do sistema no regime Kondo, apresentamos resultados que descrevem a evolução do nível efetivo $\tilde{\epsilon}_\alpha$ e da densidade de estados(DOS) no PQ, ambos em função do potencial de porta V_g . Apresentamos também resultados que mostram o comportamento dos operadores que chamamos de bósons escravos e dos multiplicadores de Lagrange. Esses resultados evidenciam a natureza Kondo do sistema e deixam claro o papel de cada bóson e de cada multiplicador de Lagrange na inserção do sistema nesse regime.

2.1

Ponto quântico conectado a um contato metálico

O sistema que estamos propondo para descrever o método dos bósons escravos consiste de uma única impureza ligada a um contato metálico e está representado na figura 2.1. No caso, a impureza é representada por um PQ e o contato por um reservatório de elétrons. Esse sistema pode ser descrito por

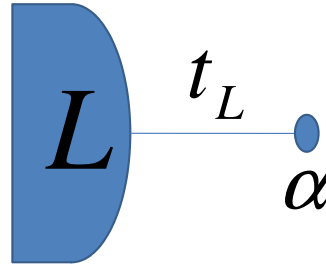


Figura 2.1: A figura mostra um sistema composto por um simples PQ conectado a um contato metálico.

um Hamiltoniano tipo de Anderson (38), escrito como

$$\begin{aligned}
 H = & \sum_{\sigma} \epsilon_{\alpha} n_{\alpha\sigma} + \frac{U}{2} \sum_{\sigma} n_{\alpha\sigma} n_{\alpha\bar{\sigma}} + \sum_{\sigma} t_L (c_{L\sigma}^{\dagger} c_{\alpha\sigma} + c_{\alpha\sigma}^{\dagger} c_{L\sigma}) + \\
 & + \sum_{\substack{i=-1 \\ \sigma}}^{-\infty} t (c_{i\sigma}^{\dagger} c_{i-1\sigma} + c_{i-1\sigma}^{\dagger} c_{i\sigma}). \quad (2-1)
 \end{aligned}$$

Nesse Hamiltoniano $c_{\alpha\sigma}^{\dagger}$ e $c_{\alpha\sigma}$ são operadores fermiônicos responsáveis por criar e destruir um elétron de spin σ no PQ α , respectivamente. O termo ϵ_{α} representa o nível de energia do estado local no PQ (que pode ser modificado através aplicação de um potencial de porta na base do PQ), U é a interação Coulombiana no interior do PQ e t_L , conhecido como termo de hopping, descreve a conexão do PQ α com o reservatório de elétrons. Esse termo está associado à probabilidade de um elétron saltar do reservatório para o PQ α e vice-versa.

2.2

Formalismo de bósons escravos na aproximação de campo médio

O método dos bósons escravos consiste em introduzir no Hamiltoniano um conjunto de operadores bosônicos que permitem incorporar ao sistema a física subjacente ao efeito Kondo. No caso, o espaço de Hilbert é aumentado pela introdução dos operadores $e_{\alpha}^{\dagger}(e_{\alpha})$, $p_{\alpha\sigma}^{\dagger}(p_{\alpha\sigma})$, e $d_{\alpha}^{\dagger}(d_{\alpha})$. Esses operadores são responsáveis por projetar o sistema nos estados do vazio $|0_i\rangle$, de simples $|\sigma_i\rangle$, e de dupla ocupação eletrônica $|d_i\rangle$, respectivamente. Com o objetivo de eliminar os estados não físicos restringimos o espaço de Hilbert impondo que

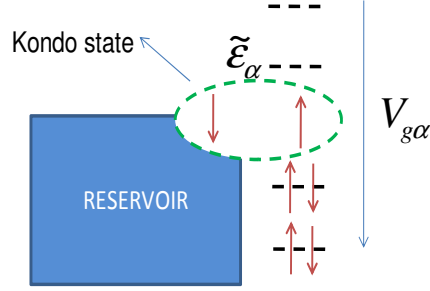


Figura 2.2: A figura mostra o reservatório de elétrons representado pelo contato metálico e os níveis de energia no PQ, controlados através do potencial de porta $V_{g\alpha}$ aplicado na base do PQ.

$$P_\alpha \equiv e_\alpha^\dagger e_\alpha + \sum_\sigma p_{\alpha\sigma}^\dagger p_{\alpha\sigma} + d_\alpha^\dagger d_\alpha - 1 = 0 \quad (2-2)$$

e

$$Q_\alpha \equiv c_{\alpha\sigma}^\dagger c_{\alpha\sigma} - p_{\alpha\sigma}^\dagger p_{\alpha\sigma} - d_\alpha^\dagger d_\alpha = 0. \quad (2-3)$$

Esses vínculos são inseridos no Hamiltoniano através dos multiplicadores de Lagrange λ_1 e $\lambda_{2\sigma}$ e correspondem, respectivamente, a relação de completudeza e a correspondência entre férmions e bósons. O fato dos bósons terem que satisfazer essas condições é o que justifica sua denominação de escravos. Com o auxílio desses bósons os estados do vazio, de simples e de dupla ocupação são construídos a partir do vácuo como

$$\begin{aligned} |0_\alpha\rangle &= e_\alpha^\dagger |vac\rangle \\ |\sigma_\alpha\rangle &= c_{\alpha\sigma}^\dagger p_{\alpha\sigma}^\dagger |vac\rangle \\ |d_\alpha\rangle &= c_{\alpha\sigma}^\dagger c_{\alpha\bar{\sigma}}^\dagger d_\alpha^\dagger |vac\rangle. \end{aligned} \quad (2-4)$$

As expressões acima mostram que, para que seja considerada a física incorporada ao sistema pelos operadores bosônicos, no que diz respeito aos processos de criação e aniquilação de estados, os operadores $c_{\alpha\sigma}^\dagger$ e $c_{\alpha\sigma}$ devem ser hibridizados com os bósons escravos,

$$c_{\alpha\sigma}^\dagger \rightarrow c_{\alpha\sigma}^\dagger Z_{\alpha\sigma}^\dagger \quad (2-5)$$

$$c_{\alpha\sigma} \rightarrow Z_{\alpha\sigma} c_{\alpha\sigma}. \quad (2-6)$$

No caso, o processo de hibridização se dá por meio do operador Z_α que, escrito na forma

$$Z_{\alpha\sigma} = [1 - d_\alpha^\dagger d_\alpha - p_{\alpha\sigma}^\dagger p_{\alpha\sigma}]^{-\frac{1}{2}} (e_\alpha^\dagger p_{\alpha\sigma} + p_{\alpha\sigma}^\dagger d_\alpha) [1 - d_\alpha^\dagger d_\alpha - p_{\alpha\sigma}^\dagger p_{\alpha\sigma}]^{-\frac{1}{2}}, \quad (2-7)$$

reproduz o limite não interagente $U = 0$.

Levando em (2-1) os operadores hibridizados e considerando os vínculos (2-2) e (2-3) escrevemos o Hamiltoniano efetivo

$$\begin{aligned} H_{eff} = & \sum_{\sigma} \epsilon_{\alpha} c_{\alpha\sigma}^{\dagger} c_{\alpha\sigma} + U d_{\alpha}^{\dagger} d_{\alpha} + t_L \sum_{\sigma} (c_{\alpha\sigma}^{\dagger} Z_{\alpha\sigma}^{\dagger} c_{L\sigma} + c_{L\sigma}^{\dagger} Z_{\alpha\sigma} c_{\alpha\sigma}) + \\ & + \sum_{i=-1}^{-\infty} t (c_{i\sigma}^{\dagger} c_{i-1\sigma} + c_{i-1\sigma}^{\dagger} c_{i\sigma}) + \lambda_1^{\alpha} (e_{\alpha}^{\dagger} e_{\alpha} + \sum_{\sigma} p_{\alpha\sigma}^{\dagger} p_{\alpha\sigma} + d_{\alpha}^{\dagger} - 1) + \\ & + \sum_{\sigma} \lambda_{2\sigma}^{\alpha} (c_{\alpha\sigma}^{\dagger} c_{\alpha\sigma} - p_{\alpha\sigma}^{\dagger} p_{\alpha\sigma} - d_{\alpha}^{\dagger} d_{\alpha}), \end{aligned} \quad (2-8)$$

onde λ_1^{α} e $\lambda_{2\sigma}^{\alpha}$ são multiplicadores de Lagrange. Esse Hamiltoniano descreve toda a física do sistema, inclusive o regime Kondo. Em nosso trabalho consideramos uma aproximação de campo médio. Nesta aproximação desprezamos a dinâmica dos operadores bosônicos $e_{\alpha}^{\dagger}(e)$, $p_{\alpha\sigma}^{\dagger}(p_{\alpha\sigma})$, e $d_{\alpha}^{\dagger}(d)$ e substituímos esses operadores por seus respectivos valores médios. Com esta aproximação o Hamiltoniano efetivo fica escrito como:

$$\begin{aligned} \langle H_{eff} \rangle = & \sum_{\sigma} \epsilon_{\alpha} c_{\alpha\sigma}^{\dagger} c_{\alpha\sigma} + U \langle d_{\alpha} \rangle^2 + \sum_{\sigma} t_L \bar{Z}_{\sigma} (c_{\alpha\sigma}^{\dagger} c_{L\sigma} + c_{L\sigma}^{\dagger} c_{\alpha\sigma}) + \\ & + \sum_{j=-\infty}^{-1} t (c_{j\sigma}^{\dagger} c_{j-1\sigma} + c_{j-1\sigma}^{\dagger} c_{j\sigma}) + \lambda_1^{\alpha} (\langle e_{\alpha} \rangle^2 + \sum_{\sigma} \langle p_{\alpha\sigma} \rangle^2 + \langle d_{\alpha} \rangle^2 - 1) + \\ & + \sum_{\sigma} \lambda_{2\sigma}^{\alpha} (\langle c_{\alpha\sigma}^{\dagger} c_{\alpha\sigma} \rangle - \langle p_{\alpha\sigma} \rangle^2 - \langle d_{\alpha} \rangle^2). \end{aligned} \quad (2-9)$$

Observamos neste Hamiltoniano que o efeito produzido pela inserção dos bósons escravos consiste em renormalizar a energia do estado local através do multiplicador de Lagrange $\lambda_{2\sigma}^{\alpha}$, resultando num nível efetivo de energia $\tilde{\epsilon}_{\alpha} = \epsilon_{\alpha} + \lambda_{2\sigma}^{\alpha}$, e também a conexão t_L com o PQ. No caso esta conexão fica $\tilde{t}_{\alpha} = t_{\alpha} \bar{Z}_{\alpha}$, onde, na aproximação de campo médio,

$$\begin{aligned} \bar{Z}_{\alpha\sigma} = & [1 - \langle d_{\alpha} \rangle^2 - \langle p_{\alpha\sigma} \rangle^2]^{-1/2} (\langle e_{\alpha} \rangle \langle p_{\alpha\sigma} \rangle + \langle p_{\alpha\sigma} \rangle \langle d_{\alpha} \rangle) \times \\ & \times [1 - \langle e_{\alpha} \rangle^2 - \langle p_{\alpha\sigma} \rangle^2]^{-1/2}. \end{aligned} \quad (2-10)$$

Minimizando a energia em relação aos operadores bosônicos e aos mul-

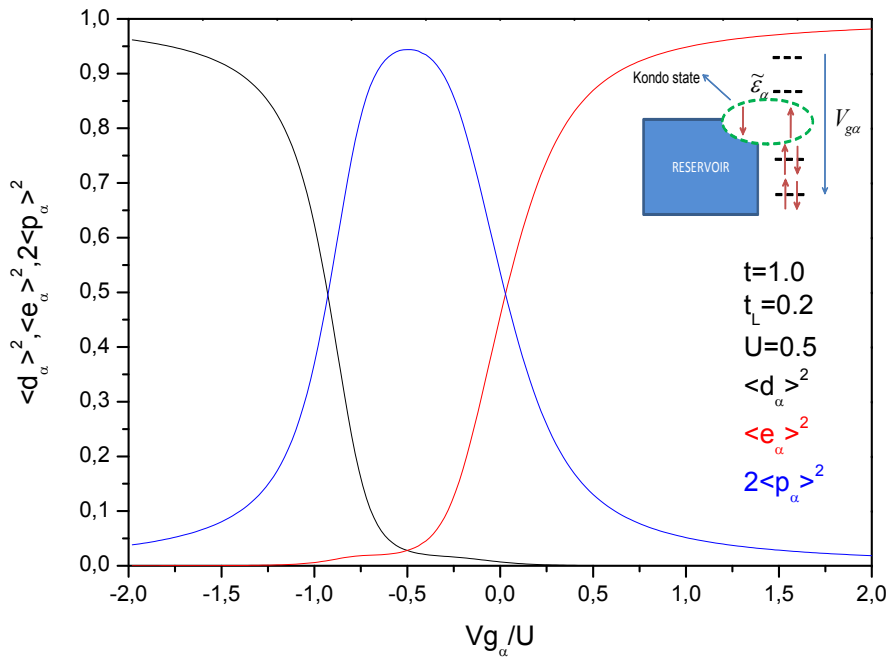


Figura 2.3: A figura mostra os valores médios dos operadores e_α , $p_{\alpha\sigma}$ e d_α em função do potencial de porta $V_{g\alpha}$ aplicado na base do PQ.

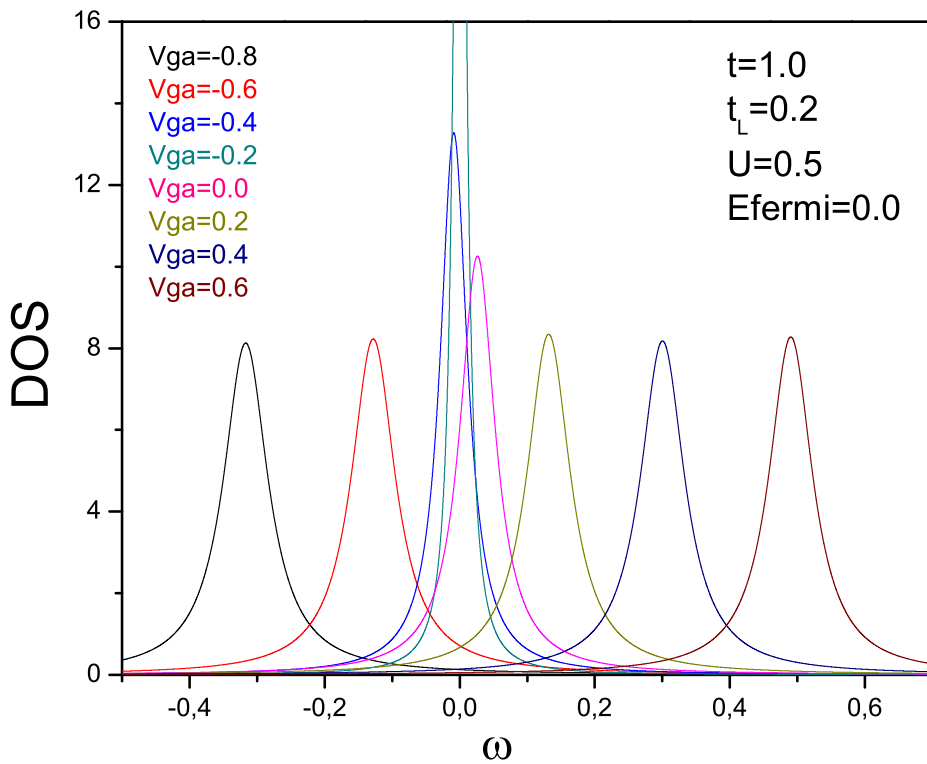


Figura 2.4: A figura mostra as DOS's calculadas para alguns valores do potencial de porta aplicado na base do PQ. No resultado fica evidente a natureza Kondo do sistema com a persistência dessas curvas no nível de Fermi.

tiplicadores de Lagrange obtemos o conjunto de equações diferenciais não lineares,

$$\begin{aligned} \frac{\partial \langle H_{eff} \rangle}{\partial \langle e_\alpha \rangle} &= \sum_\sigma t_L \frac{\partial Z_{\alpha\sigma}}{\partial \langle e_\alpha \rangle} (\langle c_{\alpha\sigma}^\dagger c_{L\sigma} \rangle + \langle c_{L\sigma}^\dagger c_{\alpha\sigma} \rangle) + 2\lambda_1^\alpha \langle e_\alpha \rangle = 0 \\ \frac{\partial \langle H_{eff} \rangle}{\partial \langle p_{\alpha\sigma} \rangle} &= t_L \frac{\partial Z_{\alpha\sigma}}{\partial \langle p_{\alpha\sigma} \rangle} (\langle c_{\alpha\sigma}^\dagger c_{L\sigma} \rangle + \langle c_{L\sigma}^\dagger c_{\alpha\sigma} \rangle) + 2(\lambda_1^\alpha - \lambda_{2\sigma}^\alpha) \langle p_{\alpha\sigma} \rangle = 0 \\ \frac{\partial \langle H_{eff} \rangle}{\partial \langle d_\alpha \rangle} &= \sum_\sigma t_L \frac{\partial Z_{\alpha\sigma}}{\partial \langle d_\alpha \rangle} (\langle c_{\alpha\sigma}^\dagger c_{L\sigma} \rangle + \langle c_{L\sigma}^\dagger c_{\alpha\sigma} \rangle) + 2(U + \lambda_1^\alpha - \sum_\sigma \lambda_{2\sigma}^\alpha) \langle d_\alpha \rangle = 0 \\ \frac{\partial \langle H_{eff} \rangle}{\partial \lambda_1^\alpha} &= \langle e_\alpha \rangle^2 + \sum_\sigma \langle p_{\alpha\sigma} \rangle^2 + \langle d_\alpha \rangle^2 - 1 = 0 \\ \frac{\partial \langle H_{eff} \rangle}{\partial \lambda_{2\sigma}^\alpha} &= \langle c_{\alpha\sigma}^\dagger c_{\alpha\sigma} \rangle - \langle p_{\alpha\sigma} \rangle^2 - \langle d_\alpha \rangle^2 = 0, \end{aligned}$$

onde definimos as derivadas

$$\frac{\partial \bar{Z}_{\alpha\sigma}}{\partial \langle e_\alpha \rangle} = S_1 S_2 [\langle p_{\alpha\sigma} \rangle + S_2^2 \langle e_\alpha \rangle (\langle e_\alpha \rangle \langle p_{\alpha\sigma} \rangle + \langle p_{\alpha\bar{\sigma}} \rangle) \langle d_\alpha \rangle] \quad (2-11)$$

$$\frac{\partial \bar{Z}_{\alpha\sigma}}{\partial \langle p_{\alpha\sigma} \rangle} = S_1 S_2 (\langle e_\alpha \rangle + \langle d_\alpha \rangle) [1 + (S_1^2 + S_2^2) \langle p_\alpha \rangle^2] \quad (2-12)$$

$$\frac{\partial \bar{Z}_{\alpha\sigma}}{\partial \langle d_\alpha \rangle} = S_1 S_2 [\langle p_{\alpha\sigma} \rangle + S_1^2 \langle d_\alpha \rangle (\langle e_\alpha \rangle \langle p_{\alpha\sigma} \rangle + \langle p_{\alpha\bar{\sigma}} \rangle) \langle d_\alpha \rangle], \quad (2-13)$$

com os termos

$$S_1 = \frac{1}{\sqrt{1 - \langle d_\alpha^2 \rangle - \langle p_{\alpha\sigma}^2 \rangle}} \quad (2-14)$$

$$S_2 = \frac{1}{\sqrt{1 - \langle e_\alpha^2 \rangle - \langle p_{\alpha\sigma}^2 \rangle}}. \quad (2-15)$$

Resolvendo esse conjunto de equações obtemos os valores médios dos bósons escravos e dos multiplicadores de Lagrange de forma auto-consistente. Isto permite que o Hamiltoniano efetivo (1-9) de um corpo possa descrever o regime Kondo, um efeito de muitos corpos.

A figura 2.3 mostra o comportamento dos valores médios dos bósons e_α , $p_{\alpha\sigma}$ e d_α em função do potencial de porta Vg_α aplicado na base do PQ. Esse resultado mostra que $\langle e_\alpha \rangle$, responsável por projetar o sistema no estado de ocupação zero, é dominante na região em que o estado $\epsilon_\alpha = \epsilon_{0\alpha} + Vg_\alpha$, com $\epsilon_{0\alpha} = 0$, está bem acima do nível de Fermi. O valor de $\langle e_\alpha \rangle$ diminui rapidamente a medida que Vg_α se aproxima do nível de Fermi e tende a zero em $-U/2$, região em que o PQ se encontra ocupado com um elétron e onde $\langle p_{\alpha\sigma} \rangle$ atinge seu valor máximo. Com o avanço de Vg_α por baixo desse ponto um segundo elétron começa a entrar no PQ aumentando o valor de $\langle d_\alpha \rangle$ que,

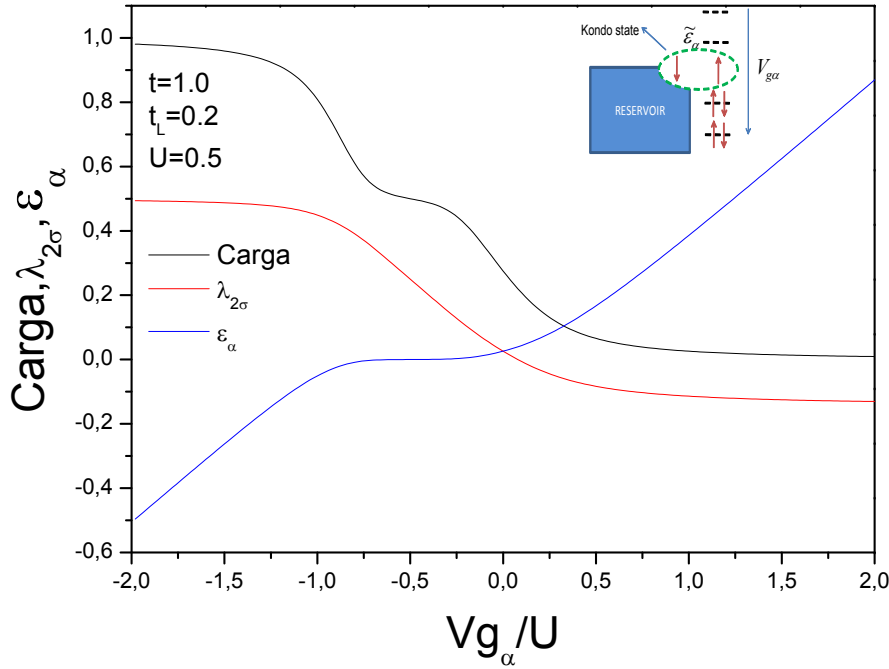


Figura 2.5: A figura mostra o comportamento do fator de renormalização $\lambda_{2\sigma}^\alpha$, do nível efetivo $\tilde{\epsilon}_\alpha$ e da ocupação eletrônica no PQ em função do potencial de porta V_α aplicado na base do PQ.

em detrimento de $\langle p_{\alpha\sigma} \rangle$, tende ao valor máximo 1 com a queda deste potencial.

Nos resultados apresentados em 2.4 e 2.5 fica evidente como se manifesta o regime Kondo do sistema na densidade de estados(DOS) calculada no PQ. Em 2.4 observamos a existência de um pico Kondo, caracterizado pela persistência no nível de Fermi quando $-U \leq V_g \leq 0$. Esse resultado está refletido na figura 2.5 no qual observamos uma estrutura de platô entre 0 e $-U$, para o estado renormalizado $\tilde{\epsilon}_\alpha$ fixado no nível de Fermi. Essa estrutura resulta do aumento do multiplicador de Lagrange $\lambda_{2\sigma}^\alpha$ compensando a variação de Vg_α como pode ser concluído observando a figura. Finalmente, observando o comportamento da carga notamos que o processo de ocupação dos PQ e, conseqüentemente, as propriedades de transporte, quando o sistema estiver conectado a um segundo reservatório, obedecem ao comportamento do valor médio dos operadores bosônicos em função dos parâmetros do sistema e, fundamentalmente, do nível de energia efetivo no PQ.

2.3

Bósons escravos a temperatura finita

Uma característica importante do formalismo dos bósons escravos na aproximação de campo médio está na possibilidade de trabalharmos com o sistema a uma temperatura T finita. Neste caso os valores médios $\langle e_\alpha \rangle$, $\langle p_{\alpha\sigma} \rangle$ e $\langle d_\alpha \rangle$, assim como os multiplicadores de Lagrange λ_1^α e $\lambda_{2\sigma}^\alpha$ são obtidos

minimizando a energia livre F do sistema em relação a cada um destes parâmetros, de acordo com o teorema de Hellman Feynman. Esta energia é dada por

$$F = -TK \ln(Z), \quad (2-16)$$

onde K é a constante de Boltzman e Z a função de partição definida para o sistema. Sendo $E_i(\lambda_i)$ as auto-energias deste sistema, com λ_i representando os parâmetros associados ao método, definimos a função de partição

$$Z = \sum_i e^{-\beta E_i(\lambda_i)}, \quad (2-17)$$

onde $\beta = 1/T$. Substituindo esta expressão em F obtemos

$$F = -TK \ln \sum_i (e^{-\beta E_i(\lambda_i)}). \quad (2-18)$$

Minimizando esta energia em relação a λ_i temos

$$\begin{aligned} \frac{\partial F}{\partial \lambda_i} &= T\beta K \frac{\sum_i \frac{\partial E_i}{\partial \lambda_i} e^{-\beta E_i}}{\sum_i e^{-\beta E_i(\lambda)}} \\ &= K \left\langle \frac{\partial E_i}{\partial \lambda_i} \right\rangle \\ &= K \frac{\partial \langle E_i \rangle}{\partial \lambda_i}, \end{aligned} \quad (2-19)$$

que corresponde a $\frac{\partial \langle H_{eff} \rangle}{\partial \lambda_i}$. Mostramos a partir deste cálculo que, no contexto de uma aproximação de campo médio, minimizar a energia livre S do sistema em relação aos valores médios dos bósons e aos multiplicadores de Lagrange é equivalente a minimizar o valor médio do próprio Hamiltoniano. Esta propriedade é importante pois mostra que as dificuldades numéricas associadas ao método dos bósons escravos não são aumentadas quando estudamos o sistema a temperatura finita.

O estudo a temperatura finita será realizado em todos os sistemas de PQ's abordados nesta tese. Sua importância está na possibilidade de obtermos a temperatura Kondo T_K do sistema através de uma característica particular do método dos bósons escravos, que consiste em desacoplar o sistema quando sua temperatura atinge um valor $T_c \approx T_K$. Este desacoplamento se dá através do parâmetro Z que renormaliza as conexões e que tende a zero quando $T \approx T_c$. Na figura 2.6 mostramos o comportamento deste parâmetro com a temperatura para o sistema de um PQ que estamos considerando neste capítulo. Também mostramos as curvas para a DOS no PQ α . Estudamos o parâmetro Z em

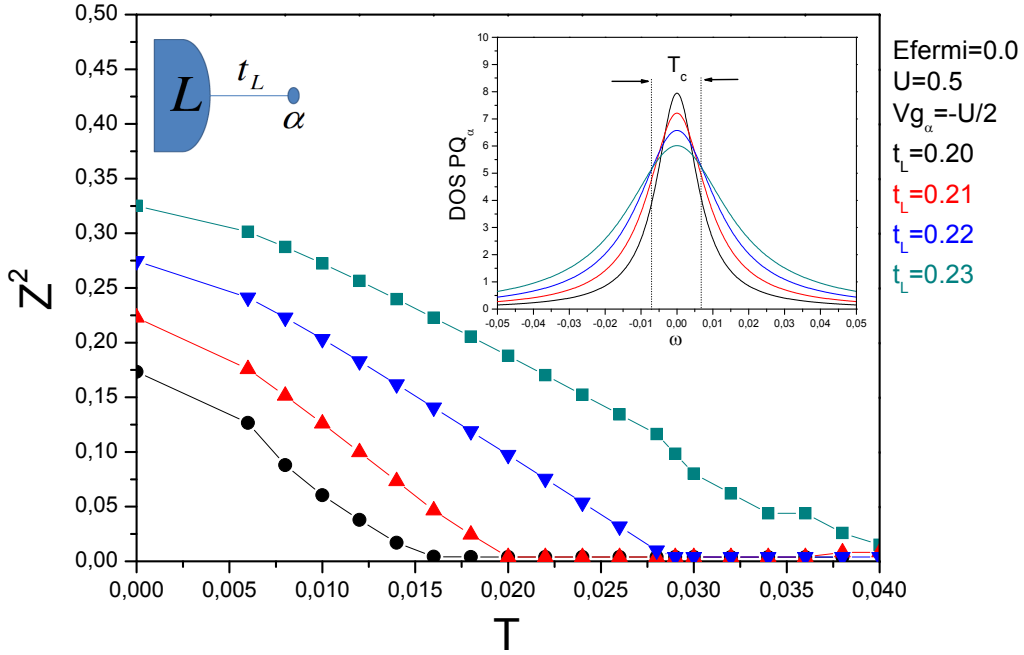


Figura 2.6: A figura mostra o comportamento do parâmetro Z^2 em função da temperatura e para quatro diferentes valores da conexão t_L entre o PQ e o contato metálico. Também mostra a DOS calculada no PQ em $T = 0$ para os valores de t_L que correspondem as curvas de Z^2 . Para obtermos este resultado ajustamos em $Vg_\alpha = -U/2$ o potencial de porta aplicado na base do PQ, na posição de simetria elétron-buraco.

função da temperatura T com o sistema na posição de simetria partícula-buraco, $Vg_\alpha = -U/2$, e para quatro diferentes valores da conexão t_L entre o PQ e o contato metálico. Observamos nos resultados que a temperatura Kondo do sistema é da ordem da largura dos picos obtidos para DOS e que aumenta com o valor desta conexão. Este comportamento reflete o fortalecimento da correlação anti-ferro (correlação Kondo) entre o spin do elétron no PQ e os spins de condução no contato metálico com o aumento da conexão t_L , sendo necessário valores cada vez mais altos de temperatura para a destruição do estado Kondo estabelecido através desta correlação.

2.4 Resumo

Neste capítulo apresentamos o método dos bósons escravos na aproximação de campo médio através de sua aplicação ao sistema de um PQ, com interação Coulombiana U finita, conectado a um contato metálico. Mostramos que o regime Kondo é introduzido neste sistema com a renormalização do nível de energia local $\tilde{\epsilon}_\alpha$ no PQ α através do multiplicador de Lagrange $\lambda_{2\sigma}^\alpha$ e com a renormalização da conexão t_L através do parâmetro Z , definido em termos

dos valores médios dos operadores bosônicos $\langle e_\alpha \rangle$, $\langle p_{\alpha\sigma} \rangle$ e $\langle d_\alpha \rangle$. Estendemos a aplicação do método a um estudo do sistema a temperatura finita, $T \neq 0$. Estudamos o comportamento do parâmetro Z que renormaliza t_L em função da temperatura e, baseado na propriedade do método dos bósons escravos de desacoplar o sistema quando $T \approx T_K$, propomos um método para o cálculo da temperatura Kondo T_k do sistema.

3

Nuvem Kondo em estruturas de PQ's.

3.1

Introdução

Neste capítulo o formalismo dos bósons escravos é aplicado no tratamento de um problema bastante discutido em física, que diz respeito a existência e a extensão espacial do que chamamos de "nuvem Kondo" (53, 54). O conceito de nuvem é utilizado para ilustrar uma estrutura de dimensões da ordem da extensão espacial da correlação entre o spin da impureza magnética e o spin dos elétrons da banda de condução criada pela interação Coulombiana na impureza localizada. Efeitos resultantes de dispersões angulares dificultam a observação dessa nuvem em sistemas de três ou até mesmo de duas dimensões, como no caso clássico de impurezas magnéticas depositadas sobre uma matriz metálica (64). A extensão não considerável da nuvem Kondo nessas dimensões explica, em parte, certos comportamentos, como a dependência linear das propriedades desses sistemas em relação ao número de impurezas, deixando evidente sua independência e o fato delas não se "enxergarem" magneticamente.

No tratamento do problema Kondo em uma dimensão, como no caso dos sistemas de PQ's que estudamos nesta tese, a nuvem Kondo pode se

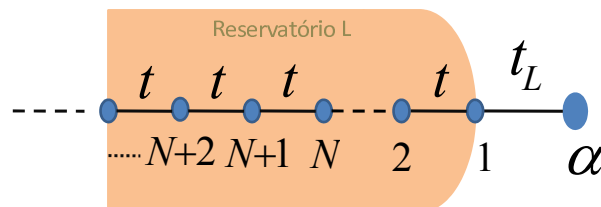


Figura 3.1: A figura mostra o sistema de um PQ com interação Coulombiana U conectado a um reservatório de elétrons. Na figura, evidenciamos a possibilidade de representarmos o reservatório como uma cadeia semi-infinita de PQ's não interagentes.

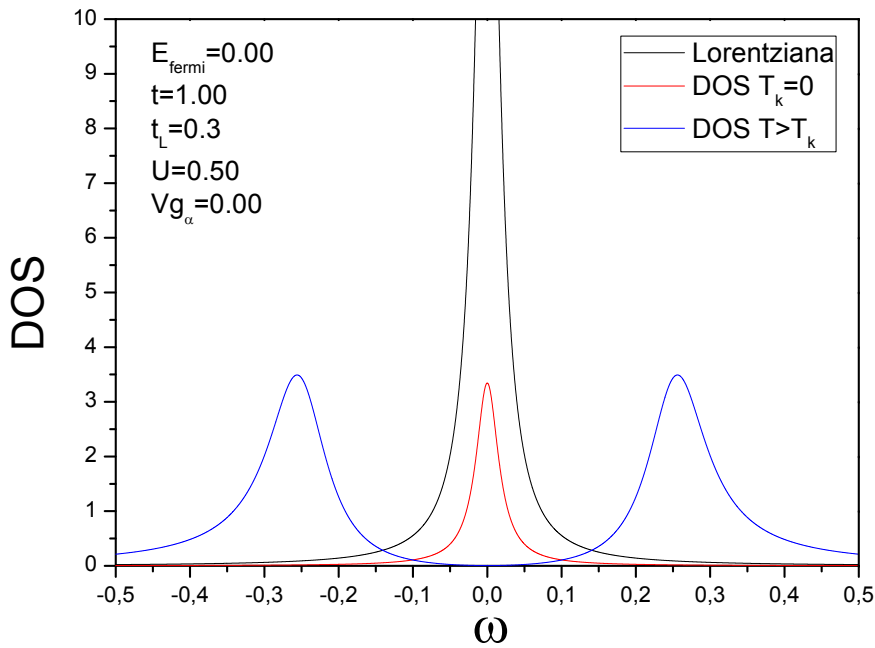


Figura 3.2: A figura mostra a DOS na impureza obtida para $T < T_k$ (linha vermelha) e $T > T_k$ (linha azul) da DOS em sítios no interior do reservatório. A curva em preto corresponde a uma gaussiana de mesma largura que o pico Kondo.

apresentar de forma bastante nítida, e com uma extensão que pode ser estimada de forma quantitativa através do método que estamos propondo, baseado no cálculo da densidade de estados local (DOS) em sítios localizados à diferentes distâncias da impureza. Para iniciar um estudo sobre as propriedades da nuvem Kondo consideramos neste capítulo o sistema simples apresentado no capítulo anterior, que consiste de um PQ interagente conectado a uma semi-cadeia infinita que, no caso, representa um reservatório de elétrons. Nesse sistema calculamos a DOS em diferentes sítios no interior do reservatório e analisamos a forma com que essas DOS são afetadas pela presença da impureza magnética, representada, neste caso, pelo PQ interagente α . Três métodos numéricos foram utilizados para o cálculo da DOS com o sistema no regime Kondo, o Método do aglomerado embebido (65), o método de renormalização numérica (66) e o método dos bósons escravos para U finito (34) apresentado no capítulo anterior. Comparando as DOS obtidas através destes métodos com as DOS obtida para o sistema fora de Kondo, que calculamos utilizando a aproximação Hubbard I (68), determinamos, entre outras coisas, a extensão da nuvem Kondo no interior do reservatório.

Nos capítulos seguintes estendemos o estudo da nuvem Kondo a sistemas mais sofisticados onde, além de determinar sua extensão, investigamos as consequências na estrutura da nuvem provocadas pela competição entre o efeito

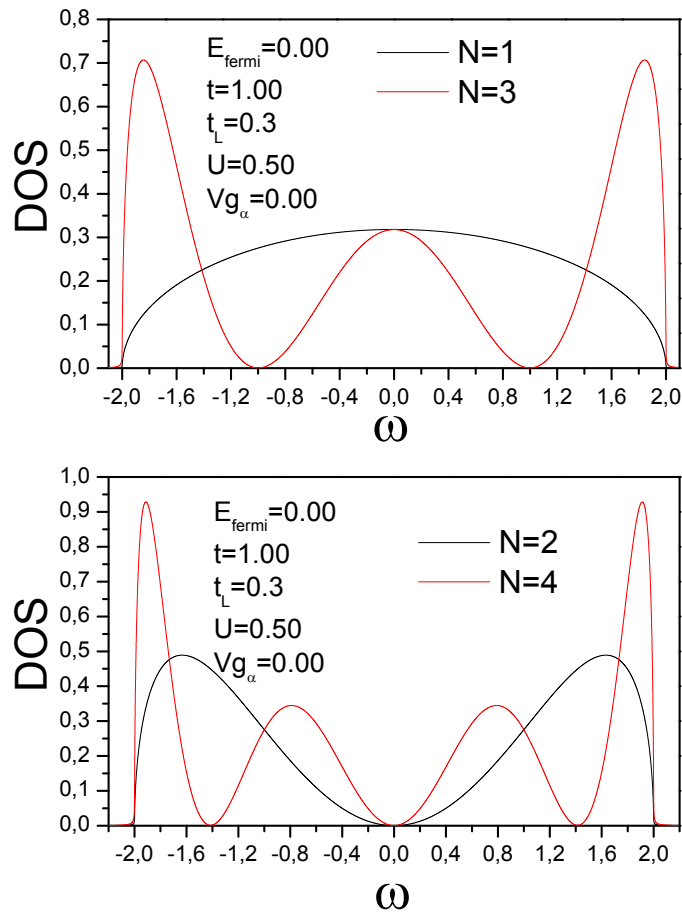


Figura 3.3: A figura mostra o comportamento para $T < T_k$ e $T > T_K$ da DOS nos quatro primeiros sítios de uma semi-cadeia desacoplada.

Kondo e as correlações magnéticas no interior do sistema de PQ's. Mais especificamente, no capítulo quatro apresentamos um estudo no qual investigamos as propriedades referentes a estrutura da nuvem Kondo num processo de destruição gradativa do estado Kondo a medida que a interação antiferro entre os elétrons é aumentada num sistema de dois PQ's interagentes conectados diretamente entre si, como na figura 4.1. No capítulo cinco apresentamos um estudo semelhante, desta vez quando dois PQ's interagentes se enxergam a partir de um terceiro PQ não intergente. Este sistema serve como base para um estudo mais abrangente das propriedades da nuvem Kondo no processo de competição entre efeito Kondo e interação RKKY (79, 80, 81) numa estrutura em que dois PQ's interagentes que são separados por uma cadeia de N sítios. Neste caso a nuvem Kondo pode ser estudada na cadeia central e dentro dos contatos metálicos.

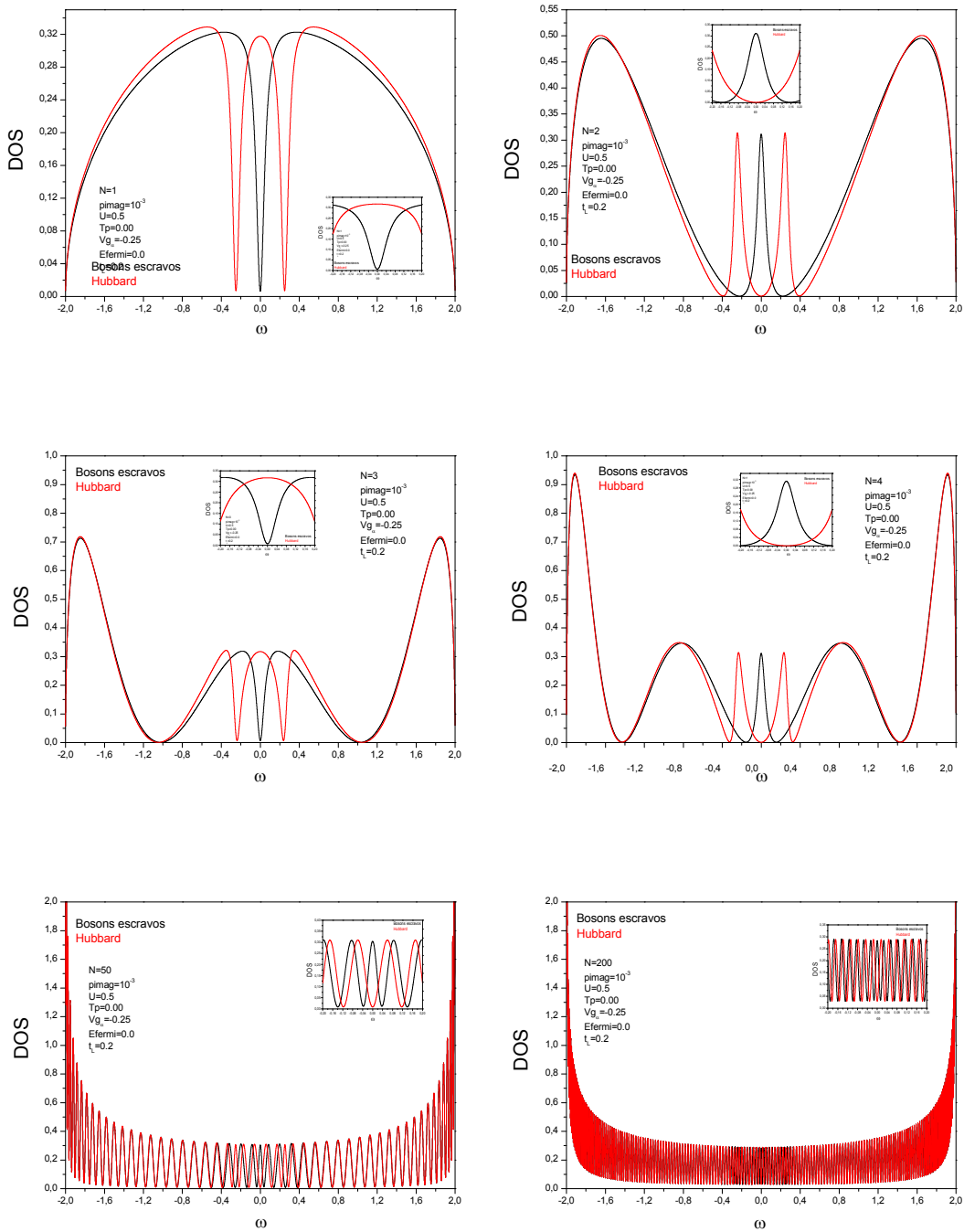


Figura 3.4: A figura mostra o comportamento para $T < T_k$ e $T > T_K$ da DOS em sítios no interior do reservatório L mostrado na figura 3.1.

3.2

Existência e extensão da nuvem Kondo

A extensão da nuvem Kondo pode ser estimada considerando que o tempo de vida das quase partículas Kondo estão relacionados com a escala de tempo $\tau_k \approx \frac{\hbar}{k_B T_k}$. Considerando que essas quase-partículas se propagam com a velocidade de Fermi v_F , podemos associar o comprimento da nuvem com a quantidade

$$R_k \approx \frac{\hbar v_F}{k_B T_k}. \quad (3-1)$$

É importante observar que a quantidade v_F que aparece nessa expressão não é bem definida, uma vez que todos os elétrons que compõem a estrutura da nuvem estão dentro da faixa de energia do pico Kondo. Além disso, espera-se que esses elétrons não se propagam em bloco com velocidade v_F , mas com uma velocidade renormalizada v^* que, pela teoria de férmions pesados, é obtida como sendo $v^* = \frac{k_F}{m^*}$, onde m^* é a massa efetiva da quase partícula. A não incorporação destas propriedades na expressão 3-1 pode gerar resultados inexatos no que se refere ao comprimento R_k da nuvem Kondo. Por outro lado, essa expressão poderia, em princípio, nos fornecer de forma correta a dependência de R_k com a temperatura Kondo T_k e, de certa forma, uma referência através da qual podemos estimar o comprimento da nuvem Kondo.

Do ponto de vista teórico o problema da nuvem Kondo têm sido analisado utilizando-se diferentes métodos (56, 57, 59, 61). O estudos das propriedades de spin, através da suscetibilidade local ou da função de correlação espacial entre spins, têm fornecido contribuições significantes no que se refere a compreensão desse fenômeno. (56, 57, 59, 61, 62) Mais próximo do trabalho que estamos propondo, a análise da condutância através de um ponto quântico inserido num fio quântico (53), ou correntes persistentes num anel finito, utilizando argumentos de renormalização ou cálculos feitos com DMRG, também foram propostos como alternativas para a determinação da nuvem Kondo.

Recentemente, um método variacional foi proposto para estudar a propagação, a partir da impureza, de um buraco na densidade de estados local (64). Neste trabalho, foi possível mostrar que, em duas e três dimensões, a extensão da nuvem Kondo é da ordem de poucos comprimentos de onda apenas, devido ao efeito provocado por dispersões angulares, de tal forma que R_K é praticamente zero nessas dimensões. Isso parece explicar a irrelevância da nuvem Kondo em alguns sistemas estudados experimentalmente. Por outro lado, em sistemas de uma dimensão, a interação impureza-impureza pode ser determinada pelo comprimento R_k da nuvem Kondo. Isso produz importantes

consequências para as propriedades de condução e, portanto, deve ser levado em consideração na constituição de sistemas de PQ's integrados.

Voltando à nossa proposta, a possibilidade de se utilizar a expressão 3-1 para estimar o comprimento da nuvem Kondo é reforçada pelo trabalho de A. Holzner e co-autores (67), que calcularam as correlações de spin envolvidas na formação da nuvem Kondo num sistema de uma dimensão e obtiveram que o alcance dessa nuvem cai com o inverso da temperatura Kondo, de acordo com nossa equação.

Motivados por estes resultados, utilizamos o método dos bósons escravos para estudar o comportamento da nuvem Kondo no sistema que descrevemos no capítulo anterior, composto por um PQ conectado a um reservatório de elétrons. Nesse estudo estimamos o comprimento da nuvem Kondo a partir das propriedades eletrônicas e não das magnéticas. Para isto investigamos a propagação do efeito do pico Kondo localizado na impureza ao resto de sua vizinhança. Os resultados que obtivemos com o método dos bósons escravos são comparados com resultados obtidos a partir do método do aglomerado embebido(ECA) e com o grupo de renormalização numérica(NRG).

3.3

Cálculo da densidade de estados local

Na figura 3.1 enfatizamos a possibilidade de representar o reservatório de elétrons como uma semi-cadeia infinita de PQ's ¹. A densidade de estados local no sítio N, no interior dessa semi-cadeia, é dada por

$$\rho_N(\omega) = \frac{-1}{\pi} \text{Im}(G_{N,N}), \quad (3-2)$$

onde $G_{N,N}$ é a função de Green diagonal calculada neste sítio. Essa função permite saber como as quase-partículas do efeito Kondo, na vizinhança do nível de Fermi, se manifestam a uma distância N do sítio da impureza e pode ser escrita como

$$G_{N,N}(\omega) = \frac{g_N}{1 - t^2 g_N g_{N+1} - t^2 g_N g_{N-1}}, \quad (3-3)$$

onde as funções \tilde{g}_{N+1} e \tilde{g}_{N-1} descrevem, respectivamente, as partes do sistema correspondentes aos sítios a esquerda e a direita de N. Na figura 3.5 destacamos o sítio N no interior do contato metálico. Nesta figura destacamos que a estrutura do sistema a esquerda do sítio N corresponde a uma semi-cadeia infinita, sendo representada pela função $\tilde{g}_{N+1} = \tilde{g}_L = \frac{\omega \pm \sqrt{\omega^2 - 4t^2}}{2t^2}$. Já para a

¹Ver apêndice C na referência (32).

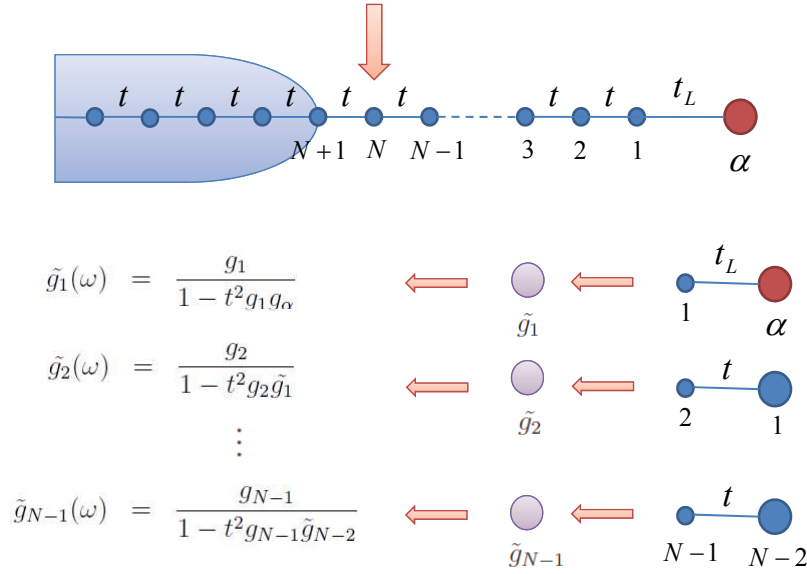


Figura 3.5: A figura mostra a disposição dos sítios no interior da semi-cadeia que representa o contato metálico. Esta figura é construída de forma tal a localizar um determinado sítio N no interior desta semi-cadeia e tornar evidente que a função de Green que descreve os sítios a esquerda de N , \tilde{g}_{N+1} , é uma função de Green de uma semi-cadeia infinita, sendo igual a \tilde{g}_L . Já para os sítios a direita de N é apresentado nesta figura um processo de renormalização a partir do qual a função de Green \tilde{g}_{N-1} , que descreve esta parte do sistema.

estrutura a direita de N , apresentamos nessa figura um processo de renormalização através do qual esta parte do sistema é construída sítio a sítio, sendo descrita pela função g_{N-1} . Após N iterações obtemos para esta função

$$\tilde{g}_{N-1} = \frac{g_{N-1}}{1 - t^2 g_{N-1} \tilde{g}_{N-2}}, \quad (3-4)$$

onde $g_i = 1/(\omega - \epsilon_i - i\eta)$ é a função de Green de um corpo associada ao i -ésimo sítio da semi-cadeia.

Na figura 3.4 mostramos a DOS calculada em alguns sítios no interior da semi-cadeia com o método dos bósons escravos. Esse resultado é obtido com $U = 0.5t$, $t_L = 0.3t$ e com potencial de porta ajustado na posição de simetria partícula-buraco, $Vg_\alpha = -\frac{U}{2}$. A DOS a temperatura zero é representada pelas linhas pretas. Nas linhas vermelhas, por comparação, mostramos a DOS quando $T > T_k$ e o sistema está fora do regime Kondo. Para obter essa solução utilizamos a aproximação Hubbard I (68), que elimina as correlações de spin entre a impureza e o reservatório. Para entender os resultados apresentados é interessante analisar as figuras 3.2 e 3.3. Na figura 3.2 a curva vermelha e azul descrevem a DOS calculada na impureza para $(T = 0)$ e $(T > T_k)$, respectivamente. Nessa figura a curva preta representa uma Lorentziana que,

como discutido nas próximas seções, tem como intuito envolver o pico Kondo e eliminar oscilações irrelevantes para o cálculo da extensão do pico Kondo (Oscilações de Friedel (58) ²). Na figura 3.3 mostramos a DOS calculada para os primeiros quatro sítios da semi-cadeia isolada e observamos que, no nível de Fermi, essa grandeza assume ordenadamente um valor finito para N ímpar e é zero para N par.

Os resultados mostrados na figura 3.4 descrevem essencialmente a hibridização entre a DOS da impureza (curva vermelha na figura 3.2) e da semi-cadeia isolada 3.3, uma vez que a impureza é acoplada a semi-cadeia. Essa hibridização se manifesta através de uma ressonância ou uma anti-ressonância observada na DOS calculada no interior da semi-cadeia como resultado da presença de um pico na DOS da impureza centrado no nível de Fermi (pico Kondo). Se nos concentrarmos nessa faixa de energia observamos que aparece ressonância num determinado sítio N se a DOS calculada no sítio correspondente da semi-cadeia desacoplada for zero no nível de Fermi. Por outro lado, se a DOS num determinado sítio apresentar uma anti-ressonância no nível de Fermi, a DOS correspondente para a semi-cadeia desconectada é diferente de zero. Essa mudança ressonância/anti-ressonância sítio a sítio na DOS é de fundamental importância para o que iremos discutir no resto do capítulo. Nosso interesse é distinguir os efeitos provocados na DOS calculada num determinado sítio no interior do reservatório pela presença ($T < T_k$) ou ausência ($T > T_k$) de uma ressonância no nível de Fermi da DOS calculada para a impureza. O alcance do efeito produzido pela hibridização da semi-cadeia com a impureza em sítios localizados cada vez mais no interior do reservatório é utilizado como uma medida da extensão da nuvem Kondo.

A figura 3.4 mostra o efeito provocado na DOS pela hibridização da semi-cadeia desacoplada com a impureza magnética, representada pelo PQ α . Se observarmos a região de energia próxima ao nível de Fermi ($\omega \simeq 0$) notamos uma diferença acentuada entre as DOS calculadas para $T = 0$ e $T > T_k$, com uma ressonância ou uma anti-ressonância que, como mencionado anteriormente, vão se intercalando sítio a sítio. Essa diferença resulta da presença de um pico na DOS da impureza para $T = 0$ (pico Kondo) e se torna menor, no sentido de abranger uma região mais fina do espectro de energia, a medida que entramos no reservatório. Utilizando uma Lorentziana, como a apresentada na figura 3.2 (curva preta), concentraremos nossa atenção na região próxima ao nível de Fermi, e extrairemos a essência da perturbação no mar de Fermi provocada pela presença da impureza no regime Kondo. Os dois últimos quadros da figura 3.4

²Em nosso trabalho as oscilações de Friedel resultam da integral $\int_{-\infty}^{\infty} f(\omega, T) \text{Im}G_{NN}(\omega) d\omega$ sobre a distribuição de Fermi $f(\omega, T)$ à temperatura $T = 0$.

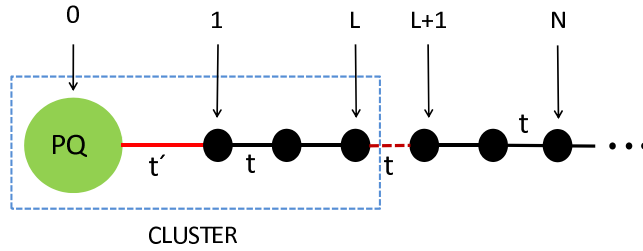


Figura 3.6: A figura destaca, através da linha pontilhada, o aglomerado de PQ's que é considerado no método do aglomerado embebido(ECA).

mostram que essa perturbação se estende por uma região limitada no interior do reservatório aparecendo fracamente no sítio $N = 50$ e muito menos ainda no sítio $N = 200$, relativamente afastado da impureza. Nosso objetivo nesse capítulo é investigar como a influência do estado Kondo no mar de Fermi se estende espacialmente dependendo da única escala de energia associada ao regime Kondo, a temperatura Kondo T_k .

3.4

Outros métodos numéricos

Nesta seção apresentamos o resumo de dois outros métodos numéricos que são utilizados no tratamento do problema Kondo em estruturas nanoscópicas. No caso, o método do aglomerado embebido(ECA) e o método do grupo de renormalização numérica(NRG). Na próxima seção, os resultados que se referem as propriedades da nuvem Kondo, e que são obtidos com esses métodos, são comparados com os resultados que obtivemos com o método dos bósons escravos para U finito que apresentamos no capítulo anterior. A discussão das propriedades da nuvem Kondo envolvendo esses três métodos se faz importante no sentido de dar confiabilidade ao estudo desenvolvido nesta tese, no que diz respeito a extensão espacial da nuvem Kondo.

3.4.1

Método do aglomerado embebido

O método do aglomerado embebido é utilizado no estudo de sistemas de PQ's que consistem de uma região interagente fracamente acoplada a bandas de condução não interagentes que consideramos unidimensionais. O método é baseado na ideia de que os efeitos de muitos corpos provocados pela impureza tem um caráter local, e consiste de três etapas que iremos descrever através da aplicação ao sistema de uma impureza que estamos tratando. A primeira etapa

consiste em isolar um aglomerado composto pela impureza conectada com os L primeiros sítios mais próximos do contato que é descrito por uma semi-cadeia. Esse aglomerado é mostrado na figura 3.6 por uma linha tracejada, sendo o primeiro sítio fora do cluster corresponde ao índice $i = L + 1$, e engloba a maior parte dos efeitos de muitos corpos presentes no sistema. A segunda etapa do método consiste em diagonalizar exatamente o Hamiltoniano que corresponde ao cluster, utilizando, por exemplo, o método de Lanczos (69), e calcular todas as funções de Green. A terceira etapa é vestir estas funções de Green utilizando uma equação de Dyson (65) e incorporar nessas funções a física que corresponde ao resto sistema.

Sendo $g_{i,j}$ a função de Green que propaga um elétron entre os sítios i e j dentro do aglomerado e g_{L+1} a função de Green do primeiro sítio fora do aglomerado, a função de Green vestida no sítio i dentro do aglomerado é obtida a partir da equação de Dyson

$$G_{ii} = g_{ii} + g_{iL}tG_{L+1,i}, \quad (3-5)$$

onde, por sua vez,

$$G_{L+1,i} = g_{L+1}tG_{Li}. \quad (3-6)$$

Observamos que o parâmetro t na equação 3-5 corresponde a união entre o aglomerado, onde estão englobados os efeitos provenientes das interações de muitos corpos, e o resto dos sítios pertencentes a semi-cadeia. Esse elemento de matriz possui os mesmos valores que todos os outros termos de hopping dentro da semi-cadeia. Resolvendo esse sistema de equações podemos obter as funções de Green do sistema completo de onde é possível obter uma série de propriedades físicas como a condutância através da impureza e a DOS nos sítios do sistema. Para o estudo da nuvem Kondo os resultados usando o método do ECA foram desenvolvidos pelos professores Carlos Büsser e George Martins da Okland University, USA.

3.4.2

Grupo de renormalização numérica

O método do grupo de renormalização numérica foi originalmente proposto por K. G. Wilson para estudar problemas associados a impurezas magnéticas. Inicialmente, esse método foi aplicado ao Hamiltoniano Kondo (39), e depois estendido ao modelo de Anderson (38). Este método numérico permite estudar, em princípio exatamente, as propriedades dos estados

eletrônicos muito perto do nível de Fermi de qualquer um desses dois modelos. Numa descrição breve do método apresentamos as duas principais etapas para a sua implementação. A primeira consiste em dividir a banda de condução em um conjunto de intervalos de energia discretizados logaritmicamente $[x_n, x_{N-1}]$, definido por $x_N = D\Lambda^{-N}$, onde Λ é o parâmetro de discretização e D é a metade da largura da banda de condução. Então, para cada intervalo, apenas um valor representativo de energia é considerado ³. O número total de energias representativas, uma para cada valor, resulta num conjunto de energias discretizadas que se acoplam a impureza. Depois desses dois passos, o Hamiltoniano total é mapeado numa semi-cadeia infinita, conhecida como cadeia de Wilson, onde cada sítio da cadeia corresponde a uma escala de energia na banda de condução discretizada logaritmicamente, com a impureza localizada no seu primeiro sítio. É importante notar que as conexões t_n entre os sítios adjacentes n e $n+1$, decrescem com a distância⁴ até a impureza, como $\Lambda^{-N/2}$. A forma final do Hamiltoniano no formalismo do grupo de renormalização fica

$$H = \lim_{N \rightarrow \infty} \Lambda^{-(N-1)/2} H_N, \quad (3-7)$$

com

$$\begin{aligned} H_N = & \Lambda^{(N-1)/2} [H_{imp} + t' \sum_{\sigma} (d_{\sigma}^{\dagger} c_{0\sigma} + c_{0\sigma}^{\dagger} d_{\sigma}) + \sum_{n=0, \sigma}^N \epsilon_n c_{n\sigma}^{\dagger} c_{n,\sigma} + \\ & + \sum_{n=0, \sigma}^{N-1} t_n (c_{n\sigma}^{\dagger} c_{n+1, \sigma} + c_{n+1\sigma}^{\dagger} c_{n,\sigma}), \end{aligned} \quad (3-8)$$

onde os operadores $d_{\sigma}^{\dagger}(d_{\sigma})$ e $c_{n\sigma}^{\dagger}(c_{n\sigma})$ criam(aniquilam) um elétron de spin σ na impureza e na cadeia semi-infinita, respectivamente.

Observamos que uma expressão analítica explícita para t_n na equação 3-8 não pode ser obtida para uma banda de formato arbitrário. No caso em questão, em que uma banda semi-elíptica é usada, somos forçados a calcular t_n numericamente. Destacamos a importância de não confundir o termo de hopping t_n que define a cadeia de Wilson com o elemento de matriz t da semi-cadeia mostrada na figura 3.1. O elemento t_n corresponde a banda obtida depois da discretização logarítmica de uma semi-cadeia que não está definida num espaço real. Pode ser mostrado que $t_n \rightarrow t$ quando $\Lambda \rightarrow 1$ (70).

O segundo passo importante consiste em resolver numericamente o

³ Esse valor é escolhido de acordo com um critério bem definido (71).

⁴Nesse caso N não é um sítio do espaço real, portanto o termo utilizado não corresponde a uma distância propriamente dita.

Hamiltoniano 3-7. Para isso, começamos com um sistema composto apenas pela impureza isolada, descrita pelo Hamiltoniano H_{imp} . Os sítios subsequentes são adicionados um a um. Esse processo produz uma sequência de Hamiltonianos H_N , que são resolvidos da seguinte maneira: numa dada iteração N o Hamiltoniano H_N é diagonalizado numericamente. Os autovetores e os autovalores correspondentes são obtidos. Depois, um novo sítio $N+1$ é adicionado. Isso é feito aumentando-se o espaço de Hilbert (associado a iteração N) através do produto tensorial de seus elementos com os estados do sítio adicionado na próxima iteração. Esse processo resulta num crescimento exponencial da dimensão do espaço de Hilbert após sucessivas iterações. Devido a limitações computacionais, é necessário truncar o espaço de Hilbert em cada iteração, depois que ele atinge um determinado tamanho. O critério de truncamento do NRG é pegar apenas os M estados de mais baixa energia de H_N (tipicamente, $M=1000$), e negligenciar os valores mais altos do espectro de energia.

O processo de adicionar um único sítio a H_N é repetido até o sistema atingir o ponto fixo de acoplamento mais forte. Quando esse ponto é atingido, H_N e H_{N+2} possuem os mesmos autovalores.

A sequência de iterações descritas acima pode ser pensada como um processo associado a um grupo de renormalização. Adicionar um sítio a cadeia, e obter um novo espectro de energia, pode ser entendida como uma transformação de um grupo de renormalização R que mapeia o Hamiltoniano H_N num novo Hamiltoniano $H_{N+1} = R(H_N)$, que têm a mesma forma que H_N . Uma vez que os pontos fixos são obtidos, as propriedades estáticas e dinâmicas do sistema, assim como os efeitos relacionados a temperatura, são calculados. O número de iterações na obtenção dos pontos fixos depende do parâmetro de discretização Λ . Quanto maior o valor deste parâmetro mais rápido é o processo de convergência, mas pior é a descrição dos estados longe do nível de Fermi. Em geral, $2 < \Lambda < 4$ é o intervalo de valores de Λ que permite conciliar os dois efeitos opostos. Em particular, estamos interessados na função de Green local da impureza.

Na parte final do capítulo apresentamos alguns resultados obtidos com o grupo de renormalização numérica para o problema da nuvem Kondo que estamos tratando. Esses resultados são comparados com os do método dos bósons escravos e foram obtidos pelo professor Edson Vernek da Universidade de Uberlândia com $\Lambda = 2.5$, pegando os $M=1000$ estados de mais baixa energia em cada interação. Para calcular a DOS na impureza, a função delta foi alargada utilizando-se Gaussianas Logarítmicas com um fator $b = 0.6$.

3.5

Resultados numéricos

Nesta seção apresentamos os resultados que obtivemos com o método dos bósons escravos para o problema da extensão espacial da nuvem Kondo dentro do contacto metálico L mostrado na figura 3.1. No sentido de enfatizar a validade dos resultados obtidos para a extensão da nuvem Kondo comparamos nossos resultados com os obtidos através do Método do Aglomerado Embebido (ECA) e do Grupo de Renormalização Numérica (NRG) que foram discutidos no capítulo anterior.

Se considerarmos a largura Δ do pico Kondo proporcional a T_k , como mencionamos na parte introdutória deste capítulo, temos que o valor estimado para comprimento R_k da nuvem Kondo é dado por

$$R_k \approx \frac{1}{\Delta}. \quad (3-9)$$

Em nossa proposta vamos estimar esse comprimento através da perturbação na DOS local nos sítios dentro da semi-cadeia provocada pela presença do pico Kondo na impureza quando o sistema está em $T = 0$ relativo a situação quando ele está a $T > T_k$. Essa perturbação, num determinado sítio N no interior da semi-cadeia, é quantificada pelo valor absoluto da função $F(N)$, que definimos por

$$F(N) = \int_{-\infty}^{+\infty} [\rho_N^k(\omega) - \rho_N^{nk}(\omega)] L_\Delta(\omega) d\omega, \quad (3-10)$$

onde ρ_N^k e ρ_N^{nk} são as DOS locais no sítio N no interior da semi-cadeia, calculadas para $T = 0$ e $T > T_k$, respectivamente. $L_\Delta(\omega)$ é uma Lorentziana de largura Δ , que utilizamos com o objetivo de eliminar as oscilações de Friedel e concentrar nossa investigação aos efeitos produzidos na faixa de energia próxima ao nível de Fermi. De fato, os resultados que apresentamos na figura 3.4 para ρ_N^k e ρ_N^{nk} no interior dos reservatórios mostram que a diferença entre essas DOS só é considerável na região em torno desse nível de energia.

Os resultados dessa figura também mostram que, a medida que entramos no reservatório, os efeitos em torno do nível de Fermi provocados pela presença do pico Kondo na impureza vão diminuindo, como podemos observar nos dois últimos quadros da figura, para $N = 50$ e $N = 200$. Nesses sítios $\rho_N^k = \rho_N^{nk}$ e $F(N) \approx 0$. A função $F(N)$ pode, então, ser utilizada para obter a escala de comprimento a partir da qual a presença da impureza se torna irrelevante e da mesma maneira a nuvem Kondo.

Na figura 3.7 é mostrado em escala logarítmica o valor absoluto de $F(N)$

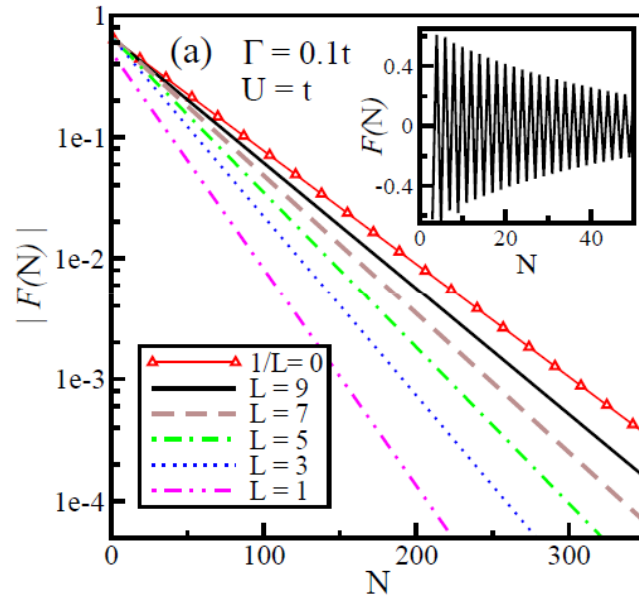


Figura 3.7: A figura mostra a função $F(N)$, calculada utilizando ECA para diferentes tamanhos L do aglomerado. Os parâmetros utilizados são $U = t$ e $\Gamma = 0.1t$. Nesta figura a curva vermelha apresenta uma extrapolação de $F(N)$ para o limite termodinâmico.

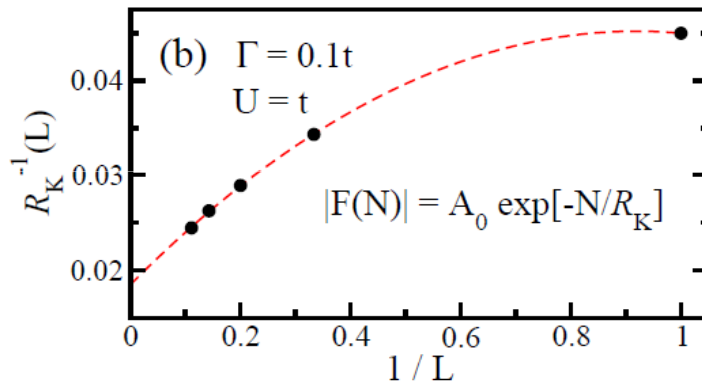


Figura 3.8: A figura mostra a uma extrapolação de R_k ao regime termodinâmico quando o comprimento L do aglomerado tende a infinito.

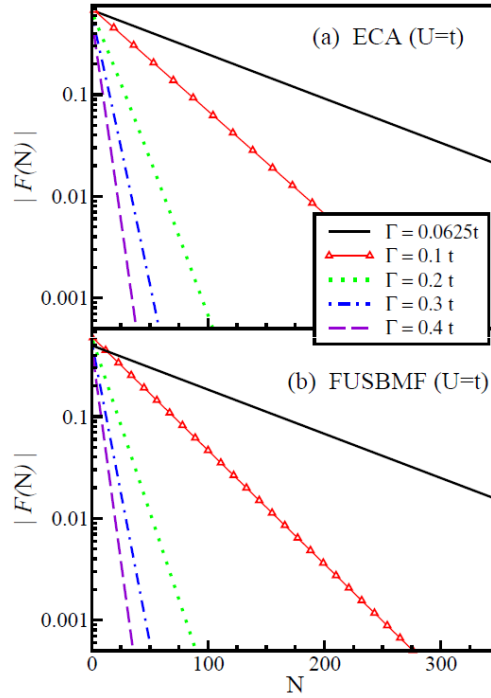


Figura 3.9: A figura mostra a função $F(N)$ para diferentes valores da constante de acoplamento Γ . Em (a) temos a extrapolação de $F(N)$ ao limite termodinâmico para cada valor de Γ e em (b) temos os resultados obtidos com o método dos bósons escravos.

em função de N , calculado pelo método do aglomerado embebido (ECA). Para esse resultado adotaram-se os parâmetros $U = t$, $\Gamma = 0.1t$ e diferentes valores para o comprimento L do cluster. As curvas pontilhadas descrevem a função $F(N)$ para alguns valores de N , para diferentes comprimentos L do aglomerado. Observamos neste gráfico que, para todos os valores de L considerados, a função $F(N)$ se comporta como uma exponencial do tipo

$$|F(N)| = A_0 e^{-N/R_k}. \quad (3-11)$$

As linhas sólidas na parte (A) da figura 3.11 mostram que a equação 3-11 fita perfeitamente os resultados obtidos. As partes (b) e (c) da figura mostram que os resultados obtidos com o método dos bósons escravos para U finito e com o grupo de renormalização, respectivamente, também estão de acordo com a equação 3-11. Voltando a figura 3.7 notamos no quadro menor que $F(N)$ oscila entre valores positivos e negativos para sucessivos N . Isso é consequência direta da oscilação ressonância/anti-ressonância discutida na seção 1.2.

A figura 3.8 mostra, num gráfico de R_k em função de $1/L$, a extensão

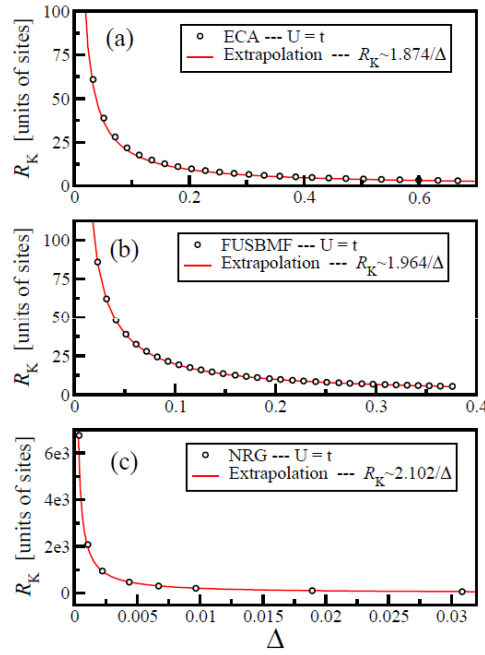


Figura 3.10: A figura mostra, para os três métodos discutidos, o comprimento R_k da nuvem Kondo em função da largura Δ do pico Kondo no nível de Fermi.

da nuvem Kondo para os diferentes tamanhos de aglomerado considerados no cálculo com ECA. Esses resultados são fitados por uma função polinomial (linha pontilhada) a partir da qual podemos obter uma extrapolação para o valor de R_k quando o comprimento do cluster é infinito ($L \rightarrow \infty$). O valor de R_k resultante dessa extrapolação pode ser substituído na função 3-11 para obter o limite termodinâmico da curva $F(N)$, que, para $\Gamma = 0.1t$, corresponde aos triângulos abertos mostrado na figura 3.7.

Observamos que com o Grupo de Renormalização e com o método dos bósons escravos o comprimento do aglomerado é $L = 0$ e não existe extrapolação para a função $F(N)$. Nesse caso os A_0 e R_k são obtidos diretamente do gráfico obtido para $F(N)$. No caso, as curvas cortam o eixo das ordenadas em $\ln A_0$ e seus coeficientes angulares são dados por $-1/R_k$.

Depois que mostramos como o limite termodinâmico de R_k é obtido para os três métodos utilizados, queremos analisar a dependência desses valores com os parâmetros do sistema. Na parte (a) da figura 3.9 apresentamos as curvas $F(N)$ obtidas com os valores extrapolados de R_k usando o método do aglomerado embebido para $U = 1.0$ e diferentes valores da constante de acoplamento Γ (de 0.0625 à 0.4). Esse resultado mostra que R_k decresce com o aumento gradativo de Γ . Este resultado se mostrou consistente com o que obtivemos, na parte (b) da figura, com o método dos bósons escravos. Como esperado, observamos que o comprimento da nuvem Kondo (calculado a partir da função $F(N)$) aumenta com U/Γ . Podemos entender esse comportamento

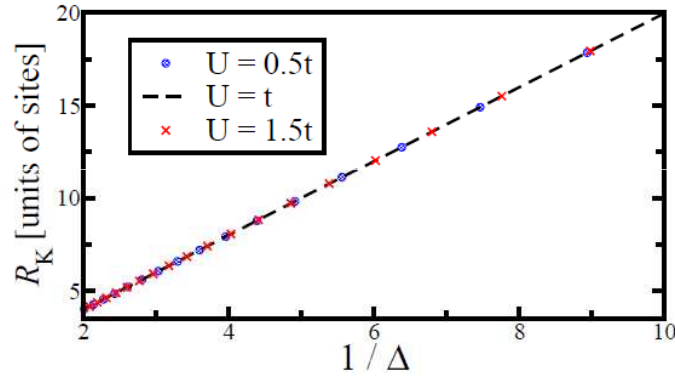


Figura 3.11: A figura mostra o comprimento da nuvem Kondo em função de $1/\Delta(T_k)$ para três diferentes valores U da interação Coulombiana na impureza.

notando que, com o aumento de Γ (para um valor fixo de U), a temperatura Kondo T_k também aumenta e R_k , conforme obtemos, decai.

Na figura 3.11 mostramos o decaimento de R_k para diferentes valores de Γ obtidos em (a) utilizando ECA, em (b) bósons escravos e em (c) utilizado NRG. Esses resultados são graficados em função da semi-largura Δ do pico Kondo. Observamos que a dependência de R_k com Δ satisfaz a relação dada pela equação 3-9. Para enfatizar isso cada conjunto de dados, obtidos com cada um dos métodos, é fitado com uma função proporcional a $1/\Delta$. O resultado é apresentado na figura 3.11 e mostra que o coeficiente de proporcionalidade entre R_k e $1/\Delta$ são bem similares nos três métodos empregados. No caso, $R_k \approx 2.0/\Gamma$. O fator de proporcionalidade na equação 3-9 é de 1.847 para ECA, 1.964 para os bósons escravos e 2.102 para o NRG. Enquanto que esses fatores são semelhantes entre ECA e bósons escravos, existe uma discrepância de aproximadamente 10% com o NRG. Acredita-se que essa diferença é proveniente do parâmetro b utilizado nesse método para alargar na DOS através de uma gaussiana logarítmica, uma vez que o valor Δ obtido pelo NRG é muito sensível a escolha desse parâmetro arbitrário.

A figura 3.11 mostra os resultados de R_k em função de $1/\Delta$ obtidos com ECA para diferente valores de $U(0.5, 1.0$ e $1.5)$. Esses resultados mostram que as curvas colapsam para a mesma reta. Isso indica que a propagação do efeito Kondo dentro do reservatório depende apenas do parâmetro relevante do fenômeno Kondo, que é a temperatura T_k independentemente de parâmetros como a interação Coulombiana U .

A figura 3.12 mostra o comportamento do parâmetro A_0 em função de

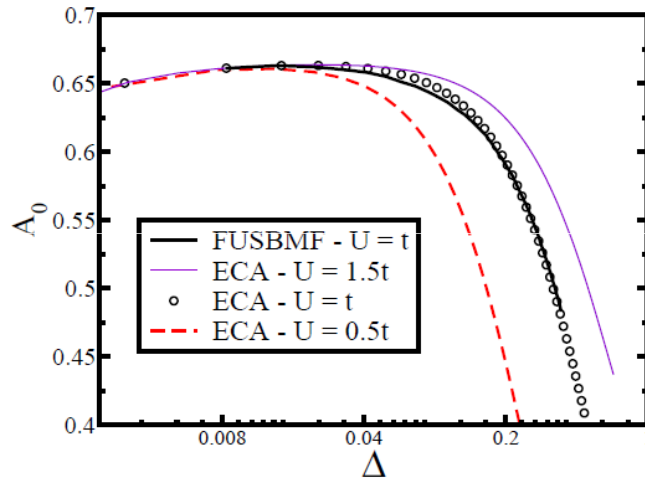


Figura 3.12: A figura mostra o parâmetro A_0 em função de Δ calculado com os bósons escravos e com ECA. Diferentes valores de U foram utilizados com ECA. Observamos que, quando Δ é pequeno, todas as curvas coincidem, como esperado, se pensarmos em termos do caráter universal que caracteriza o efeito Kondo. Aumentando Δ entramos num regime de flutuação de valência e as curvas para diferentes valores de U começam a divergir.

Δ , obtido com ECA e com bósons escravos. Observamos uma concordância entre as curvas obtidas com esses dois métodos para $U = 1.0$. Cálculos com $U = 0.5$ e $U = 1.5$ foram realizados apenas com ECA. Para esses resultados adicionais é observado que as curvas são diferentes para valores grandes de Δ mas se tornam iguais para pequenos valores desse parâmetro $\Delta < 0.04$ e praticamente independentes de Δ . Isto implicaria que a função $|F(N)|$ tem um comportamento universal trivial em função de N/R_k nesta região de Δ . Esse comportamento é entendido perfeitamente se levarmos em conta o comportamento universal do efeito Kondo, no sentido que ele é determinado por uma única escala de energia, a temperatura Kondo T_k . A forte dependência de A_0 em função de Δ , ou seja T_k para valores de $\Delta > 0.04$ é de ser esperado já que nessa região o sistema entra na região de flutuação de valência, em forma mais acentuada para os valores menores de U , já que os cálculos foram obtidos na situação de simetria elétron-buraco.

3.6 Conclusões

Sintetizando os aspectos globais que foram abordados em relação as propriedades da nuvem Kondo observamos que é a primeira vez que a DOS

local é utilizada para se estimar a extensão espacial R_k da nuvem Kondo dentro do reservatório de elétrons, que aparece como consequência dos efeitos de muitos corpos produzidos pela impureza magnética.

O comprimento da nuvem Kondo, R_k , tem sido definido na literatura como a extensão da nuvem de spins eletrônicos formada na vizinhança da impureza. Deste ponto de vista, esse comprimento corresponde essencialmente ao tamanho espacial da correlação spin-spin entre a impureza local e elétrons da banda de condução. No entanto, deixamos claro em nosso trabalho que a contrapartida espectral da carga eletrônica desse fenômeno, associada ao pico Kondo na impureza e seus efeitos na DOS local dos sítios no interior dos reservatórios, é também uma medida da nuvem Kondo. Embora esta idéia não seja explorada nesta tese, consideramos que a medição da extensão da nuvem Kondo possa ser melhor determinada experimentalmente a partir de uma medição de transporte utilizando um dispositivo STM, com a ponta podendo ser deslocada ao longo do sistema, que uma medição da correlação de spin de maior dificuldade de realização. De todas as formas até o momento a extensão da nuvem Kondo não foi possível de ser determinada experimentalmente. Apesar de representarem, essencialmente, manifestações espectrais e de spin para os mesmos fenômenos físicos, observamos que é mais fácil calcular a função $F(N)$ do que obter funções baseadas em correlação de spin.

4

Efeito Kondo e a interação antiferromagnética numa molécula de dois PQ's.

4.1

Introdução

Neste capítulo estudamos a competição entre o efeito Kondo e a interação antiferromagnética na molécula de dois PQ's (40, 41, 42, 43, 46) apresentada na figura 4.1. Nesta molécula os PQ's estão conectados, cada um, a um reservatório de elétrons e entre si através de uma conexão representada por $t_{\alpha\beta}$. Para pequenos valores dessa conexão os spins dos elétrons dos PQ's se acoplam antiferromagneticamente com os spins dos elétrons de condução nos reservatórios formando o estado singleto, que conhecemos como estado Kondo. No capítulo anterior discutimos como a presença deste estado se reflete na existência de uma correlação entre o spin local do PQ e o spin dos elétrons de condução que se estende através dos reservatórios, que chamamos de nuvem Kondo, e cujas propriedades estão estritamente relacionadas a escala de energia característica do sistema, a temperatura Kondo (44). Nossa proposta aqui é investigar a concorrência entre o estado Kondo e a interação anti-ferro entre os spins dos PQ's α e β . Esta concorrência entre a interação anti-ferro dos spins dos PQ's e a correlação Kondo do spin de cada PQ com os spins dos elétrons de seus

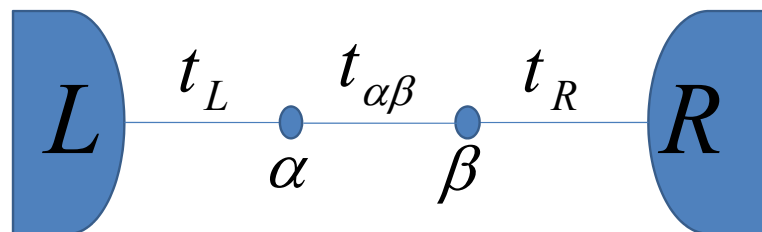


Figura 4.1: A figura mostra uma molécula artificial constituída por uma estrutura de dois PQ's conectados a dois reservatórios de elétrons.

contatos está na base da assim chamada "transição quântica" que apresentam materiais fortemente correlacionados quando submetidos por exemplo a pressão hidrostática ou química. No nosso caso estamos interessados em estudar as propriedades do processo de transição em que o sistema passa do regime Kondo ao regime molecular a medida que aumentamos o valor da conexão $t_{\alpha\beta}$ entre os PQ's. Este é um problema extensamente estudado nas últimas décadas utilizando estados fundamentais variacionais ou métodos numéricos como NRG no Hamiltoniano Kondo (39). Mais recentemente foram estudadas as propriedades de transporte quântico entre dois PQ's no contexto do formalismo dos bósons escravos no limite $U \rightarrow \infty$ (45). Neste último caso utilizando o Hamiltoniano de Anderson (38), mais adequado para analisar um sistema com flutuação de carga, em princípio fora de equilíbrio, característico de um fenômeno de transporte. Também foram desenvolvidos estudos de transporte nanoscópico deste sistema utilizando métodos numéricos como LDECA (17) e bósons escravos para U finito (32, 34) que não requerem da artificialidade de incorporar um J efetivo entre os PQ's. Entretanto consideramos que existem aspectos conceituais deste problema ainda não completamente bem entendidos como o regime molecular de uma e duas cargas e a dependência da temperatura Kondo em função da interação entre os PQ's. Neste estudo, como em toda tese, será utilizado o formalismo dos bósons escravos na aproximação de campo médio, para o Hamiltoniano de Anderson de U finito. Isto nos permite ir ganhando experiência para resolver um problema mais complexo que é o da interação RKKY entre duas impurezas Kondo a uma distância arbitrária e, em particular, as suas propriedades de transporte. Como uma forma de entender estas propriedades analisaremos a extensão da nuvem Kondo em função dos parâmetros que definem o sistema. Em particular, através deste estudo obtemos a dependência da temperatura Kondo, associada ao comprimento da nuvem, com o valor da conexão entre os PQ's. Ainda, para estudar essa dependência, utilizamos a propriedade inerente ao formalismo dos bósons escravos na qual o sistema é desconectado quando sua temperatura atinge o valor que corresponde a temperatura Kondo. Dentro desta perspectiva, estudamos o comportamento da condutância e do parâmetro Z , que renormaliza as conexões entre as diferentes partes do sistema, para diversos valores de temperatura.

4.2

Método dos bósons escravos

4.2.1

Hamiltoniano

As propriedades físicas inerentes ao sistema de dois PQ's apresentado na figura 4.1 são descritas pelo Hamiltoniano

$$\begin{aligned}
 H = & \sum_{\substack{i=\alpha,\beta,0 \\ \sigma}} \epsilon_i n_{i\sigma} + \sum_{i=\alpha,\beta} U_i n_{i\sigma} n_{i\bar{\sigma}} + \sum_{\sigma} t_L (c_{L\sigma}^\dagger c_{\alpha\sigma} + c_{\alpha\sigma}^\dagger c_{L\sigma}) + \\
 & + \sum_{\sigma} t_R (c_{R\sigma}^\dagger c_{\beta\sigma} + c_{\beta\sigma}^\dagger c_{R\sigma}) + \sum_{\sigma} t_{\alpha\beta} (c_{\alpha\sigma}^\dagger c_{\beta\sigma} + c_{\beta\sigma}^\dagger c_{\alpha\sigma}) + \\
 & + \sum_{\substack{i=-1 \\ \sigma}}^{-\infty} t (c_{i\sigma}^\dagger c_{i-1\sigma} + c_{i-1\sigma}^\dagger c_{i\sigma}) + \sum_{\substack{i=1 \\ \sigma}}^{\infty} t (c_{i\sigma}^\dagger c_{i+1\sigma} + c_{i+1\sigma}^\dagger c_{i\sigma}), \quad (4-1)
 \end{aligned}$$

onde $c_{i\sigma}^\dagger (c_{i\sigma})$ é o operador responsável pela criação e destruição de um elétron de spin σ no sítio i (com $i = \alpha, \beta$ e também para sítios 1,2,3,...no interior dos reservatórios), $\epsilon_{\alpha(\beta)}$ é o nível de energia local do PQ $\alpha(\beta)$, $t_{L(R)}$ a conexão com os reservatórios e $t_{\alpha\beta}$ a conexão entre os PQ's α e β . Ainda neste Hamiltoniano, os dois últimos termos descrevem os reservatórios da esquerda e da direita, respectivamente.

No contexto do formalismo dos bósons escravos na aproximação de campo médio o Hamiltoniano acima fica escrito como

$$\begin{aligned}
 \langle H_{eff} \rangle = & \sum_{\substack{i=\alpha,\beta \\ \sigma}} \epsilon_i n_{i\sigma} + \sum_{i=\alpha,\beta} \langle d_{i\sigma} \rangle^2 + \sum_{\sigma} t_L Z (c_{L\sigma}^\dagger c_{\alpha\sigma} + c_{\alpha\sigma}^\dagger c_{L\sigma}) + \sum_{\sigma} t_R Z (c_{R\sigma}^\dagger c_{\beta\sigma} + c_{\beta\sigma}^\dagger c_{R\sigma}) + \\
 & + \sum_{\sigma} t_{\alpha\beta} Z^2 (c_{\alpha\sigma}^\dagger c_{\beta\sigma} + c_{\beta\sigma}^\dagger c_{\alpha\sigma}) + \sum_{\substack{i=\alpha,\beta, \\ \sigma}} \lambda_1^i (\langle e_i \rangle^2 + \langle p_{i\sigma} \rangle^2 + \langle d_i \rangle^2 - 1) + \\
 & + \sum_{\substack{i=\alpha,\beta \\ \sigma}} \lambda_{2\sigma}^i (n_{i\sigma} - \langle p_{i\sigma} \rangle^2 - \langle d_i \rangle^2) + \sum_{\substack{i=-1 \\ \sigma}}^{-\infty} t (c_{i\sigma}^\dagger c_{i-1\sigma} + c_{i-1\sigma}^\dagger c_{i\sigma}) + \\
 & + \sum_{\substack{i=1 \\ \sigma}}^{\infty} t (c_{i\sigma}^\dagger c_{i+1\sigma} + c_{i+1\sigma}^\dagger c_{i\sigma}), \quad (4-2)
 \end{aligned}$$

onde $\langle e_i \rangle$, $\langle p_{i\sigma} \rangle$ e $\langle d_i \rangle$ são os valores médios dos operadores bosônicos definidos para o PQ i ($i = \alpha, \beta$). Estes operadores são responsáveis por projetar o sistema num estado com zero, um e dois elétrons, respectivamente. Ainda temos os termos λ_1^i e $\lambda_{2\sigma}^i$, que são multiplicadores de Lagrange definidos para cada PQ.

4.2.2

Sistema de equações não lineares

Minimizando a energia livre do sistema em relação aos operadores bosônicos e aos multiplicadores de Lagrange, de acordo com o teorema de Hellman Feynman, obtemos o sistema de cinco equações não lineares

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial F}{\partial \langle e_\alpha \rangle} &= \sum_{\sigma} t_L \frac{\partial Z}{\partial \langle e_\alpha \rangle} (\langle c_{L\sigma}^\dagger c_{\alpha\sigma} \rangle + \langle c_{\alpha\sigma}^\dagger c_{L\sigma} \rangle) + 2 \sum_{\sigma} t_{\alpha\beta} Z \frac{\partial Z}{\partial \langle e_\alpha \rangle} (\langle c_{\alpha\sigma}^\dagger c_{\beta\sigma} \rangle + \langle c_{\beta\sigma}^\dagger c_{\alpha\sigma} \rangle) + \\
 &\quad + 2\lambda_1^\alpha \langle e_\alpha \rangle = 0 \\
 \frac{\partial F}{\partial \langle p_{\alpha\sigma} \rangle} &= t_L \frac{\partial Z}{\partial \langle p_{\alpha\sigma} \rangle} (\langle c_{L\sigma}^\dagger c_{\alpha\sigma} \rangle + \langle c_{\alpha\sigma}^\dagger c_{L\sigma} \rangle) + 2t_{\alpha\beta} Z \frac{\partial Z}{\partial \langle p_{\alpha\sigma} \rangle} (\langle c_{\alpha\sigma}^\dagger c_{\beta\sigma} \rangle + \langle c_{\beta\sigma}^\dagger c_{\alpha\sigma} \rangle) + \\
 &\quad + 2(\lambda_1^\alpha - \lambda_{2\sigma}^\alpha) \langle p_{\alpha\sigma} \rangle = 0 \\
 \frac{\partial F}{\partial \langle d_\alpha \rangle} &= \sum_{\sigma} t_L \frac{\partial Z}{\partial \langle d_\alpha \rangle} (\langle c_{L\sigma}^\dagger c_{\alpha\sigma} \rangle + \langle c_{\alpha\sigma}^\dagger c_{L\sigma} \rangle) + 2 \sum_{\sigma} t_{\alpha\beta} Z \frac{\partial Z}{\partial \langle d_\alpha \rangle} (\langle c_{\alpha\sigma}^\dagger c_{\beta\sigma} \rangle + \langle c_{\beta\sigma}^\dagger c_{\alpha\sigma} \rangle) + \\
 &\quad + 2(U + \lambda_1^\alpha - \lambda_{2\sigma}^\alpha - \lambda_{2\bar{\sigma}}^\alpha) \langle d_\alpha \rangle = 0 \\
 \frac{\partial F}{\partial \lambda_1^\alpha} &= \langle e_\alpha \rangle^2 + \sum_{\sigma} \langle p_{\alpha\sigma} \rangle^2 + \langle d_\alpha \rangle^2 - 1 = 0 \\
 \frac{\partial F}{\partial \lambda_{2\sigma}^\alpha} &= n_{\alpha\sigma} - \langle p_{\alpha\sigma} \rangle^2 - \langle d_\alpha \rangle^2 = 0,
 \end{aligned}$$

cuja solução fornece os multiplicadores de Lagrange e os valores médios dos bósons definidos para cada PQ. Já as médias $\langle c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} \rangle$, com $i, j = \alpha, \beta, L, R$, são obtidas de forma auto-consistente a partir das funções de Green correspondentes.

4.2.3

Funções de Green

As propriedades de transporte do sistema que estamos considerando, como a carga nos PQ's e a condutância, são obtidas a partir das funções de Green deste sistema. Para o PQ $\alpha(\beta)$ temos a função de Green local

$$G_{\alpha\alpha(\beta\beta)}^\sigma = \frac{\tilde{g}_{\alpha(\beta)\sigma}}{1 - t_{\alpha\beta} \tilde{g}_{\alpha\sigma} \tilde{g}_{\beta\sigma}}, \quad (4-3)$$

obtida através de uma expansão diagramática que incorpora no PQ $\alpha(\beta)$ o resto do sistema, incluindo os reservatórios. A função $\tilde{g}_{\alpha(\beta)\sigma}$ que aparece nessa expressão descreve, por sua vez, a parte do sistema que corresponde ao PQ $\alpha(\beta)$ conectado ao seu respectivo reservatório. Calculando esta função obtemos

$$\tilde{g}_{\alpha(\beta)\sigma} = \frac{g_{\alpha(\beta)\sigma}}{1 - t_{L(R)}^2 g_{\alpha(\beta)\sigma} \tilde{g}_{L(R)}}, \quad (4-4)$$

onde $g_{\alpha(\beta)\sigma}$ é a função de Green despida do PQ $\alpha(\beta)$ e $\tilde{g}_{L(R)} = \frac{\omega \pm \sqrt{\omega^2 - 4t^2}}{2t^2}$ a função de Green do reservatório $L(R)$ projetada sobre seu sítio mais próximo de $\alpha(\beta)$.

Para as funções de Green não locais temos

$$G_{L\alpha(R\beta)}^\sigma = \frac{\tilde{g}_{L(R)\sigma} t_{\alpha\beta} \tilde{g}_{\alpha(\beta)\sigma}}{1 - t_{\alpha\beta} \tilde{g}_{\alpha\sigma} \tilde{g}_{\beta\sigma}} \quad (4-5)$$

e

$$G_{\alpha\beta}^\sigma = G_{\beta\alpha}^\sigma = \frac{g_{\alpha(\beta)\sigma} t_{\alpha\beta} \tilde{g}_{\beta\sigma}}{1 - t_{\alpha\beta} \tilde{g}_{\alpha\sigma} \tilde{g}_{\beta\sigma}}. \quad (4-6)$$

Essas funções estão associadas a propagação de elétrons do reservatório $L(R)$ para o PQ $\alpha(\beta)$ e entre os PQ's α e β , respectivamente, podendo ser utilizadas na expressão da condutância através do sistema. Para o cálculo dessa expressão utilizamos, no caso, a função $G_{\alpha\beta}^\sigma$. Assim, através do formalismo de Keldysh (47) obtemos

$$G = \frac{1}{\pi^2} t_L^2 t_R^2 \int_{-\infty}^{+\infty} f_L(\omega) f_R(\omega) |G_{\alpha\beta}^\sigma(\omega)|^2 \frac{\partial f_{L(R)}}{\partial \omega}, \quad (4-7)$$

onde $f_{L(R)}(\omega)$ é a distribuição de Fermi associada ao reservatório $L(R)$.

4.3 Nuvem Kondo

Nesta seção estudamos a forma como o estado Kondo é afetado pelo aumento gradativo da conexão $t_{\alpha\beta}$ e como isto se reflete na extensão da nuvem Kondo no interior dos reservatórios. Mais especificamente, isto permitirá estudar como a temperatura Kondo do sistema muda em função das conexões entre os PQ's. Da mesma forma que no capítulo anterior, o comprimento da nuvem é obtido a partir da função

$$F(N) = \int_{-\infty}^{+\infty} [\rho_N^k(\omega) - \rho_N^{nk}(\omega)] \rho_\alpha(\omega) d(\omega), \quad (4-8)$$

onde ρ_N^k e ρ_N^{nk} são as DOS no n -ésimo sítio da semi-cadeia que representa o reservatório para o sistema no regime Kondo e não Kondo, respectivamente. A física subjacente a solução Kondo é proveniente das impurezas magnéticas descritas pelos PQ's. Assim, para a solução não Kondo ρ_N^{nk} consideramos uma semi-cadeia isolada do PQ respectivo. Para eliminar as oscilações de Friedel (58) e estudar a propagação dos efeitos da ressonância Kondo no interior do

contato na vizinhança do nível de Fermi podemos, ao invés de uma Lorentziana, utilizamos a função $\rho_\alpha(\omega)$ que representa o próprio pico Kondo de forma que o estudo da propagação da perturbação esteja restrita a região perto do nível de Fermi.

As DOS que aparecem no integrando de $F(N)$ correspondem a parte imaginária da função de Green G_{NN} definida para o n-ésimo sítio dentro da semi-cadeia que define o reservatório de elétrons. Se considerarmos o reservatório da esquerda, por exemplo, podemos escrever essa função como

$$G_{NN} = \tilde{g}_{NN} + g_{N1}t_L G_{\alpha N}, \quad (4-9)$$

onde \tilde{g}_{NN} é a função de Green no sítio N do reservatório da esquerda quando $t_L = 0$. Para $G_{\alpha N}$ temos

$$G_{\alpha N} = G_{N\alpha} = g_{N1}t_L G_{\alpha\alpha}. \quad (4-10)$$

Levando esse resultado na equação anterior obtemos

$$G_{NN} = g_{NN} + t_L^2 (g_{N1})^2 G_{\alpha\alpha}. \quad (4-11)$$

Observamos nessa expressão que a física Kondo é inserida em G_{NN} através do termo proporcional a t_L^2 . A parte imaginária dessa função nos fornece a DOS ρ_N^k que corresponde a solução Kondo no integrando de $F(N)$. A solução para o sistema fora do regime Kondo é obtida fazendo $t_L = 0^1$ na expressão acima o que implica desconsiderar os efeitos provocados pela presença da impureza. Obtemos, assim, que $\rho_N^{nk} = \text{Im}(g_{NN})$.

Considerando as expressões analíticas obtidas para ρ_N^k e ρ_N^{nk} podemos escrever

$$\rho_N^k - \rho_N^{nk} = \text{Im}g[t_L^2 (g_{N1})^2 G_{\alpha\alpha}], \quad (4-12)$$

onde

$$g_{N1} = t^{N-1} \tilde{g}_L^N. \quad (4-13)$$

Voltando com g_{N1} em 4-14 obtemos

$$\rho_N^k - \rho_N^{nk} = \text{Im}g[t_L^2 \tilde{g}_L^{2N} t^{2N-2} G_{\alpha\alpha}]. \quad (4-14)$$

¹A solução ρ_N^{nk} , obtida com $t_L = 0$, é equivalente a solução que seria obtida à temperatura $T > T_k$ ou através de uma aproximação que desconsidere os efeitos da correlação de spin entre a impureza e os contatos metálicos, como no caso da aproximação Hubbard I.

Multiplicando esta expressão pela DOS no PQ α obtemos que a função $F(N)$ pode ser representada pela integral

$$F(N) = \int_{-\infty}^{+\infty} \text{Im}[t_L^2 \tilde{g}_L^{2N} t^{2N-2} G_{\alpha\alpha}(\omega)] \rho_{\alpha}(\omega) d\omega. \quad (4-15)$$

Esta expressão tem validade geral e pode ser utilizada em todos os sistemas de PQ's que estudamos nesta tese, com toda a física associada ao regime Kondo introduzida através da função de Green local $G_{\alpha\alpha}(\omega)$ definida para esses sistemas.

4.4 Resultados Numéricos

4.4.1 Carga e condutância do sistema

Esta seção é dedicada a apresentação dos resultados numéricos que obtivemos durante o estudo do sistema de dois PQ's apresentado neste capítulo. Nosso interesse é investigar as propriedades deste sistema em diferentes regimes nele instalados e observar de que forma estas propriedades são alteradas quando o sistema passa de um regime a outro. Procuramos também identificar as regiões de fronteira no espaço dos parâmetros que correspondem a transição entre estes regimes. Lembramos que é o sistema mais simples onde resulta possível estudar a concorrência entre o efeito Kondo e a correlação anti-ferro entre os spins dos PQ's e iluminar o problema da interação RKKY entre duas impurezas a uma distância arbitrária.

O estabelecimento de um determinado regime num sistema de PQ's pode ser controlado através da magnitude das conexões entre seus componentes e do valor do potencial de porta aplicado na base de cada PQ. No caso do sistema de dois PQ's que estamos estudando, a instalação de um regime específico é determinada pela posição do estado local nos PQ's, controlada através de potenciais de porta, e pelo valor relativo entre a conexão central $t_{\alpha\beta}$ e as conexões laterais $t_{L(R)}$, que conectam os PQ's entre si e aos reservatórios, respectivamente. Quando o sistema se encontra com dois elétrons, com o potencial de porta $Vg_{\alpha(\beta)}$ ajustado na região $-U \leq Vg_{\alpha(\beta)} \leq 0$ e o valor da conexão $t_{\alpha\beta}$ for pequeno comparado a $t_{L(R)}$, espera-se a formação de um estado Kondo como resultado do acoplamento entre os spins dos elétrons nos PQ's com os spins dos elétrons de condução em cada um dos reservatórios. A formação deste estado torna possível o transporte de elétrons na região entre 0 e $-U$ do potencial de porta aplicado. Se aumentarmos gradativamente o

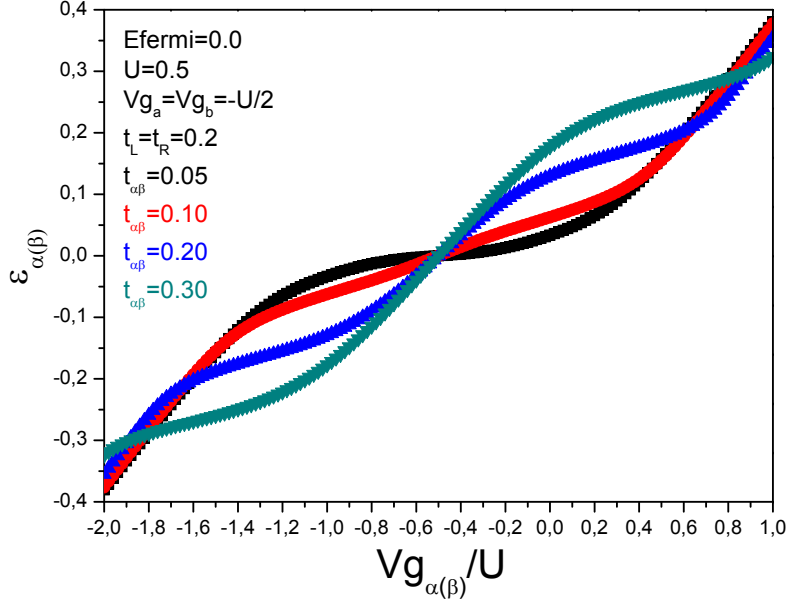


Figura 4.2: A figura mostra o comportamento do estado renormalizado $\tilde{\epsilon}_{\alpha(\beta)}$ dos PQ's interagentes em função do potencial de porta aplicado na base do PQ central para diferentes valores da conexão t_0 entre os PQ's.

valor da conexão $t_{\alpha\beta}$ os spins dos elétrons nos PQ's começam a se enxergar através de uma interação anti-ferro. O fortalecimento desta interação com o aumento no valor de $t_{\alpha\beta}$ acaba por destruir o estado Kondo singleto, caracterizado pelo acoplamento entre os spins dos PQ's com os spins dos elétrons nos reservatórios, destruindo o efeito Kondo de dois elétrons. Este fenômeno acontece pela concorrência entre duas energias características, a temperatura Kondo T_K e a interação anti-ferromagnética $\frac{4t_{\alpha\beta}^2}{U}$ entre os PQ's. Finalmente, como veremos para valores maiores de $t_{\alpha\beta}$ o sistema pode ter outro regime Kondo de um ou três elétrons que não foi bem estudado na bibliografia e que tem uma importância significativa para o entendimento das propriedades de transporte deste sistema nanoscópico.

Para entender a física associada aos regimes quânticos que descrevemos acima, assim como aos processos de transição entre eles, utilizamos, como mencionado, o método dos bósons escravos para U finito que apresentamos no segundo capítulo desta tese. De início, investigamos algumas propriedades básicas associada a física do sistema nestes regimes, que podem ser extraídas através de grandezas como a condutância G e o estado de energia renormalizado $\tilde{\epsilon}_{\alpha(\beta)}$ nos PQ's. Ainda, no que se refere as características do próprio método empregado investigamos o comportamento do parâmetro Z , responsável pela renormalização das conexões $t_{L(R)}$ e $t_{\alpha\beta}$ com os reservatórios de elétrons e entre os PQ's, respectivamente. Conforme veremos, o comportamento deste parâmetro está estritamente relacionado com a forma como o

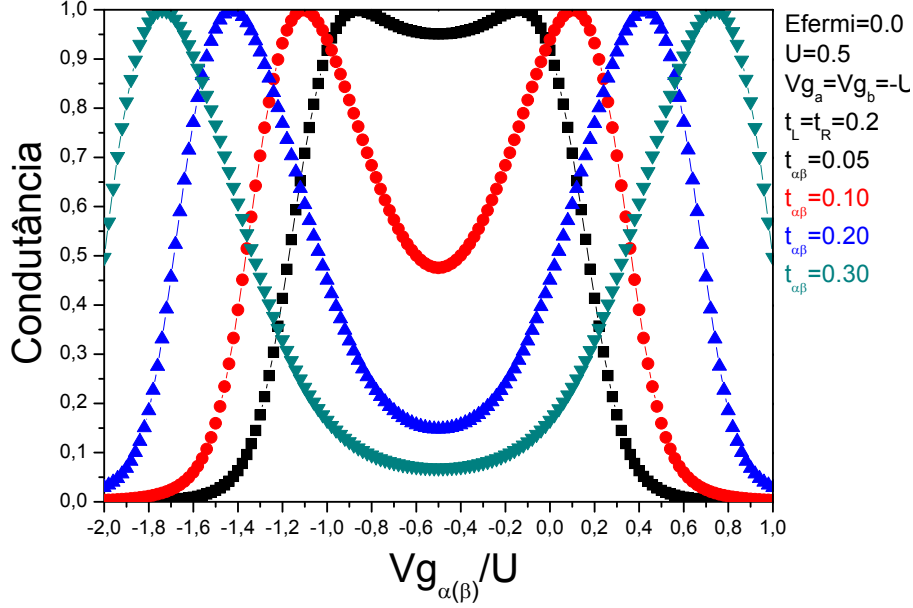


Figura 4.3: A figura mostra o comportamento da condutância em função do potencial de porta aplicado na base dos PQ's α e β para diferentes valores da conexão $t_{\alpha\beta}$ entre estes PQ's.

sistema é levado ao regime Kondo através da descrição prevista pelo método dos bósons escravos.

A figura 4.2 apresenta um resultado onde é mostrado o comportamento do nível de energia renormalizado $\tilde{\epsilon}_{\alpha(\beta)}$, que corresponde ao estado local nos PQ's α e β , em função do potencial de porta $Vg_{\alpha(\beta)}$ aplicado na base destes PQ's. Para a obtenção deste, e dos demais resultados que apresentamos neste capítulo, supomos que os PQ's α e β sejam equivalentes, assim como suas conexões com os reservatórios. As energias são calculadas tendo como unidade o elemento não diagonal t da matriz dos contatos. Desse modo, supomos que $Vg_{\alpha} = Vg_{\beta}$ e $t_L = t_R$, sendo $t_L = t_R = 0.2$. As quatro curvas apresentadas no gráfico correspondem a diferentes magnitudes adotadas para a conexão $t_{\alpha\beta}$ entre os PQ's, podendo representar, como consequência, diferentes regimes do sistema. A curva em preto, obtida para um valor pequeno de $t_{\alpha\beta}$, $t_{\alpha(\beta)} = 0.05$, mostra um platô na posição do nível de Fermi no intervalo do potencial de porta $Vg_{\alpha(\beta)}$ entre 0 e $-U$ que corresponde a dois elétrons nos PQ's. A formação deste platô reflete a natureza Kondo do sistema e está associada a persistência de picos na DOS dos PQ's na posição do nível de Fermi, o que possibilita o transporte de elétrons. Esta propriedade, semelhante as já obtidas por outros autores, se reflete no gráfico da condutância mostrado na figura 4.3, calculado com os mesmos parâmetros que o gráfico anterior. A curva em preto apresentada ($t_{\alpha\beta} = 0.05$) corresponde a curva da mesma cor na figura 4.2. Analisando os resultados de ambos os gráficos podemos observar que a

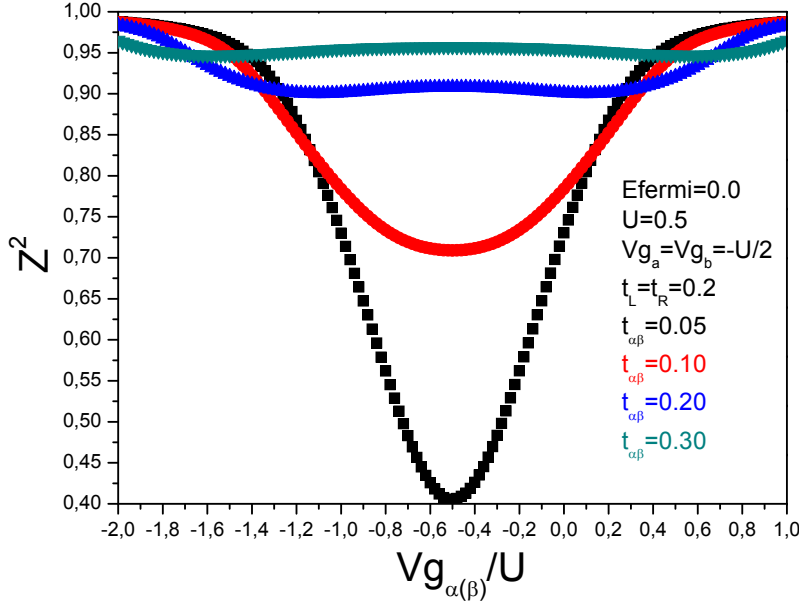


Figura 4.4: A figura mostra o comportamento do parâmetro Z^2 responsável por renormalizar as conexões com os reservatórios e entre os PQ's para diferentes valores da conexão $t_{\alpha\beta}$ entre os PQ's.

persistência de picos ressonantes da DOS dos PQ's, na posição do nível de Fermi, permite a manutenção de valores para a condutância próximos a seu máximo, em $G = 1.0$, dentro da região Kondo, que se estende de 0 a $-U$ no espaço das energias.

Paralelamente aos resultados que obtivemos para $\tilde{\epsilon}_{\alpha(\beta)}$ e para a condutância G apresentamos na figura 4.4 o comportamento do parâmetro de renormalização Z^2 . Este parâmetro, junto com os multiplicadores de Lagrange $\lambda_{\alpha(\beta)}$, que renormalizam o estado de energia local nos PQ's, são responsáveis pela descrição do Regime Kondo. De fato, observamos na curva preta, obtida para $t_{\alpha\beta} = 0.05$, e que corresponde aos resultados de $\tilde{\epsilon}_{\alpha(\beta)}$ e G que acabamos de discutir, um decréscimo significativo no valor de Z^2 dentro da região Kondo, chegando a atingir 0.4 na posição de simetria partícula-buraco, em $-U/2$. Este decréscimo se reflete diretamente na magnitude das conexões efetivas $\tilde{t}_{L(R)}$ e $\tilde{t}_{\alpha\beta}$, que passam a ser escritas em termos do parâmetro Z como $\tilde{t}_{L(R)} = t_{L(R)}Z$ e $\tilde{t}_{\alpha\beta} = t_{\alpha\beta}^0 Z^2$. Observamos nestas expressões que a conexão $\tilde{t}_{\alpha\beta}$ entre os PQ's é proporcional a Z^2 e, portanto, bem mais afetada do que a conexão $\tilde{t}_{L(R)}$ com os reservatórios, diminuindo mais rapidamente com o parâmetro renormalizador Z^2 . Assim, com Z assumindo valores cada vez menores, abaixo de 1, o acoplamento com os spins dos elétrons nos reservatórios vai sendo reforçado em detrimento do acoplamento antiferro formado entre os spins dos elétrons nos PQ's. Este processo favorece a instalação do regime Kondo no sistema, com os spins dos PQ's acoplados antiferromagneticamente com os spins nos

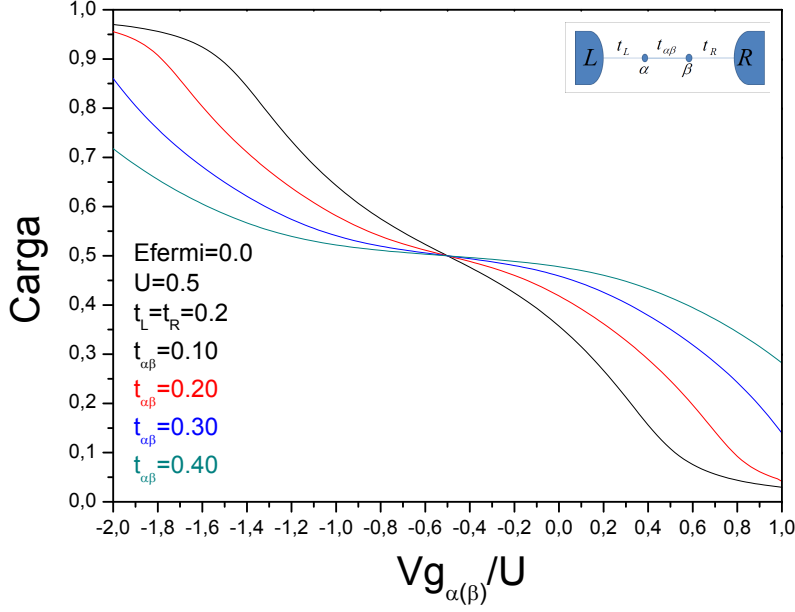


Figura 4.5: A figura mostra a carga por spin calculada no pq $\alpha(\beta)$ em função do potencial de porta $Vg_{\alpha(\beta)}$ aplicado na base desses PQ's para quatro diferentes conexões $t_{\alpha\beta}$.

reservatórios e fracamente correlacionados antiferromagneticamente entre si. Esta situação pode ser descrita com o sistema constituído por dois subsistemas, cada um com seu PQ conectado ao reservatório, de spin $S_T \cong 0$ devido a correlação Kondo e que se enxergam fracamente através do $\tilde{t}_{\alpha\beta}$.

Voltando aos resultados das figuras 4.2 e 4.3 passamos a analisar o comportamento do sistema em função do aumento no valor da conexão $t_{\alpha\beta}$ entre os PQ's. Observamos nestes resultados que o aumento de $t_{\alpha\beta}$ é responsável pela destruição do regime Kondo inicialmente instalado e por levar o sistema a um regime molecular. O dominante neste regime é o acoplamento antiferro entre os spins dos PQ's, não restando spin para ser acoplado Kondo com os contatos. A transição de regime nesta região é caracterizada pela destruição do plateau obtido para $\tilde{\epsilon}_{\alpha\beta}$ na curva preta da figura 4.2. As curvas em vermelho e roxo apresentadas nesta figura, obtidas para $t_{\alpha\beta} = 0.10$ e $t_{\alpha\beta} = 0.20$, respectivamente, mostram a destruição dessa estrutura e a transição do sistema a um regime molecular fora do regime Kondo já que $\tilde{\epsilon}_{\alpha\beta}$ muda linearmente com $Vg_{\alpha(\beta)}$ sem se estabilizar no nível de Fermi. Observamos nas curvas vermelha e roxa da figura 4.3 que essa transição dificulta o transporte de elétrons na região entre 0 e $-U$, que se reduz significativamente para valores grandes de $t_{\alpha\beta}$. Como já mencionado anteriormente as energias que entram em jogo neste comportamento são a temperatura Kondo T_K e a interação anti-ferromagnética $\frac{4t_{\alpha\beta}^2}{U}$.

Além do regime anti-ferro na região de dois elétrons, entre $Vg_{\alpha(\beta)} = 0$ e

$Vg_{\alpha(\beta)} = -U$, observamos para valores relativamente grandes da conexão $t_{\alpha\beta}$ a instalação de um regime Kondo molecular em duas outras regiões do espaço de $Vg_{\alpha(\beta)}$, em que o sistema se encontra ocupado com um e três elétrons. Este regime é caracterizado pela presença de dois platôs na curva verde ($t_{\alpha\beta} = 0.3$) do gráfico de $\tilde{\epsilon}_{\alpha(\beta)}$, um em $\epsilon_{\alpha(\beta)} = -t_{\alpha\beta}$ e outro em $\epsilon_{\alpha(\beta)} = +t_{\alpha\beta}$. A formação destes dois platôs está associada a existência de duas novas regiões de ressonância no espaço das energias que permitem o transporte de elétrons através do sistema, como pode ser visto na curva verde da figura 4.3, que mostra o aumento da condutância do sistema nessas regiões. A ocupação do sistema com um e três elétrons nestas regiões, respectivamente, é constada se observarmos o resultado da figura 4.5 onde mostramos a carga por spin em cada PQ em função do potencial de porta $Vg_{\alpha(\beta)}$ aplicado na base dos PQ's.

No gráfico da figura 4.4 observamos que, a medida que o sistema vai saindo do regime Kondo com o aumento de $t_{\alpha\beta}$, o parâmetro Z^2 vai se aproximando cada vez mais do valor 1. Observamos ainda que a curva verde tende a uma pequena depressão nas regiões de um e três elétrons, que correspondem aos platôs do regime Kondo molecular. Embora não mostrado, esta tendência se apresenta de forma mais nítida se aumentarmos $t_{\alpha\beta}$ em relação as conexões laterais $t_{L(R)}$, com a formação de dois pequenos vales na curva de Z^2 em função do potencial de porta $Vg_{\alpha(\beta)}$ aplicado na base dos PQ's. Este resultado mostra a eficiência do método dos bósons escravos para U finito no tratamento do regime Kondo molecular instalado no sistema de dois PQ's.

4.4.2

Sistema desacoplado dos reservatórios(solução exata).

Com o objetivo de entender de forma mais precisa os resultados que obtivemos para o sistema de dois PQ's, principalmente no que se refere ao regime antiferro nas regiões de dois elétrons e ao regime Kondo molecular nas regiões de um e três elétrons no espaço de $Vg_{\alpha(\beta)}$, vamos desacoplar os reservatórios, embora em equilíbrio termodinâmico com eles, e obter uma solução exata para o subsistema mostrado na figura 4.6, formado apenas pelos PQ's α e β conectados através de $t_{\alpha\beta}$. Além de ajudar na compreensão da física associada ao regime instalado no sistema, essa solução nos permite identificar, no espaço dos parâmetros, as posições de transição entre um regime e outro. A extrapolação deste estudo para o sistema completo da figura 4.1 nos permite descrever, mesmo que de forma aproximada, o deslocamento e a extensão das estruturas de platô obtidas para $\epsilon_{\alpha(\beta)} = \pm t_{\alpha\beta}$ no gráfico da figura 4.2, e que

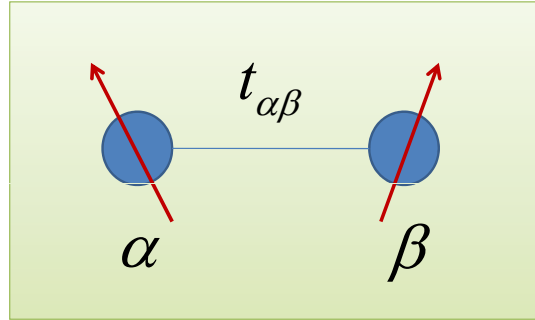


Figura 4.6: A figura mostra um sistema de dois PQ's com interação Coulombiana U e conectados entre si através $t_{\alpha\beta}$.

descrevem o regime Kondo molecular instalado no sistema.

Começamos por apresentar o Hamiltoniano

$$H = \sum_{\substack{i=\alpha,\beta \\ \sigma}} \epsilon_i n_{i\sigma} + \sum_{i=\alpha,\beta} U_i n_{i\sigma} n_{i\bar{\sigma}} + \sum_{\sigma} t_{\alpha\beta} (c_{\alpha\sigma}^{\dagger} c_{\beta\sigma} + c_{\beta\sigma}^{\dagger} c_{\alpha\sigma}),$$

que descreve o sistema desacoplado da figura 4.6 e que pode se diagonalizado de forma exata para um número N de elétrons, com $N = 1, 2, 3, 4$. Assim, para o sistema com dois elétrons, $N=2$, definimos a base de estados

$$|\varphi_1\rangle = |\uparrow\downarrow, 0\rangle \quad (4-16)$$

$$|\varphi_2\rangle = |0, \uparrow\downarrow\rangle \quad (4-17)$$

$$|\varphi_3\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [|\uparrow, \downarrow\rangle - |\downarrow, \uparrow\rangle] \quad (4-18)$$

$$|\varphi_4\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [|\uparrow, \downarrow\rangle + |\downarrow, \uparrow\rangle] \quad (4-19)$$

$$|\varphi_5\rangle = |\uparrow, \uparrow\rangle \quad (4-20)$$

$$|\varphi_6\rangle = |\downarrow, \downarrow\rangle, \quad (4-21)$$

em que $|\varphi_1\rangle$, $|\varphi_2\rangle$ e $|\varphi_3\rangle$ são estados de spin total $S_T = 0$ enquanto que $|\varphi_4\rangle$, $|\varphi_5\rangle$ e $|\varphi_6\rangle$ são estados de spin total $S_T = 1$. O Hamiltoniano, escrito nesta base, pode ser dividido em blocos, que correspondem as projeções de spin total $S_T = 0$ e $S_T = 1$. O bloco da matriz que corresponde a $S_T = 1$ já está diagonalizado e seus autovalores são $E_4 = E_5 = E_6 = 2\epsilon_0$ (por simplicidade consideramos $\epsilon_{\alpha} = \epsilon_{\beta} = \epsilon_0$). Estes elementos são as energias associadas aos estados de spin total $S_T = 1$ e $S_z = 1, 0, -1$, e que descrevem uma interação ferro entre os spins dos elétrons nos PQ's.

A parte do Hamiltoniano que corresponde a $S_T = 0$, associada a uma

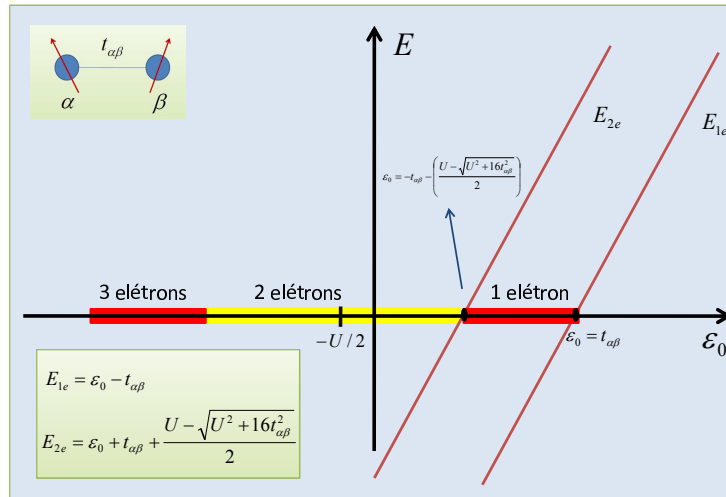


Figura 4.7: A figura mostra um perfil para a energia total do sistema em função do nível local ϵ_0 dos PQ's e destaca a existência de três regiões no espaço de ϵ_0 , que correspondem a valores de ϵ_0 para os quais o sistema se encontra ocupado com um, dois e três elétrons. Nas regiões em vermelho, de um ou três elétrons, o sistema de dois PQ's se apresenta num estado Kondo molecular. Já na região em amarelo, de dois elétrons, observamos o sistema num estado antiferro.

interação anti-ferro entre os spins nos PQ's, é dada por

$$H_{(2e)}^{AF} = \begin{pmatrix} 2\epsilon_0 + U & 0 & -\sqrt{2}t_{\alpha\beta} \\ 0 & 2\epsilon_0 + U & \sqrt{2}t_{\alpha\beta} \\ -\sqrt{2}t_{\alpha\beta} & \sqrt{2}t_{\alpha\beta} & 2\epsilon_0 \end{pmatrix}.$$

Diagonalizando este bloco do Hamiltoniano obtemos como autovalores

$$E_1 = 2\epsilon_0 + U \quad (4-22)$$

$$E_2 = \frac{1}{2}[4\epsilon_0 + U + \sqrt{U^2 + 16t_{\alpha\beta}^2}] \quad (4-23)$$

$$E_3 = \frac{1}{2}[4\epsilon_0 + U - \sqrt{U^2 + 16t_{\alpha\beta}^2}] \quad (4-24)$$

que são as auto-energias associadas aos estados de spin total $S_T = 0$. Observamos que as energias E_1 e E_2 estão sempre por cima de $2\epsilon_0$, que corresponde aos estados de $S_T = 1$. Por outro lado, observamos que, por menor que seja o valor da conexão $t_{\alpha\beta}$, o valor da energia E_3 é sempre menor que $2\epsilon_0$ e que, portanto, esta é a energia que corresponde ao estado fundamental. Para $t_{\alpha\beta} \ll U$ esta energia será $E_3 \cong 2\epsilon_0 - \frac{4t_{\alpha\beta}^2}{U}$. É claro que para $N = 2$ o regime Kondo poderá se instalar no sistema somente no caso da temperatura Kondo ser maior que o acoplamento anti-ferro entre os spins dos PQ's de forma a quebrar esta correlação e permitir que cada spin se acople Kondo separadamente com seu

reservatório associado.

A solução exata para o sistema com um elétron, $N = 1$, é obtida escrevendo-se o Hamiltoniano na base definida pelo conjunto de estados $\{|\uparrow, 0\rangle; |0, \uparrow\rangle; |\downarrow, 0\rangle; |0, \downarrow\rangle\}$. Assim, resulta

$$H^{1e} = \begin{pmatrix} \epsilon_0 & t & 0 & 0 \\ t & \epsilon_0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \epsilon_0 & t \\ 0 & 0 & t & \epsilon_0 \end{pmatrix}.$$

Diagonalizando este Hamiltoniano obtemos os autovalores $E_1^{1e} = \epsilon_0 + t$ e $E_2^{1e} = \epsilon_0 - t$, sendo E_2^{1e} a energia que corresponde ao estado fundamental do sistema com um elétron. A curva que representa essa energia é mostrada no diagrama da figura 4.7 pela reta que passa à direita da região destacada em vermelho, que corresponde a região de um elétron, na qual o sistema apresenta um estado Kondo molecular. A outra região em vermelho mostrada neste diagrama corresponde a ocupação $N = 3$ e é equivalente a primeira, por questão de simetria. Já a região em amarelo descreve o sistema com dois elétrons, $N = 2$, na qual apresenta um estado anti-ferro entre os spins dos elétrons nos PQ's.

O diagrama da figura 4.7, referido no parágrafo anterior, descreve a energia total do sistema em função da energia do estado ϵ_0 localizado nos PQ's, sendo construído com o objetivo de auxiliar nosso estudo e resumir as conclusões que obtivemos a partir da solução exata para o sistema de dois PQ's com um, dois e três elétrons. Este diagrama representa não apenas as regiões que correspondem aos diferentes regimes instalados no sistema, mas também identifica as interfaces entre estas regiões, onde ocorrem as transições quânticas responsáveis pela passagem do sistema de um regime a outro. Em nosso sistema essas interfaces são quatro, caracterizadas pelas transições de N entre zero e quatro elétrons. Duas destas estão destacadas no diagrama pela intersecção entre as curvas E_{1e} e E_{2e} com ϵ_0 no eixo das abscissas e correspondem as transições de $N = 0$ a $N = 1$ e de $N = 1$ a $N = 2$, respectivamente, na ocupações eletrônica do sistema. As outras duas são análogas as primeiras, por simetria, e descrevem as transições de $N = 2$ a $N = 3$ e de $N = 3$ a $N = 4$ elétrons.

A reta $E_{1e} = \epsilon_0 - t_{\alpha\beta}$ apresentada no diagrama descreve a energia necessária para a entrada do primeiro elétron no sistema de PQ's. Fazendo $E_{1e} = 0$, obtemos que o primeiro elétron entra no sistema quando $\epsilon_0 = t_{\alpha\beta}$. Esta relação descreve a primeira interface entre os regimes instalados no sistema, com a transição do estado de ocupação $N=0$ para um estado de ocupação

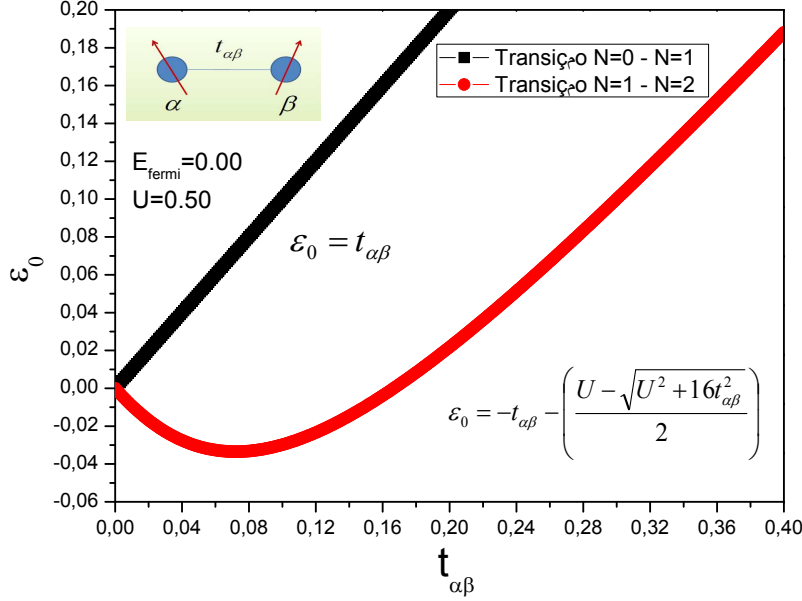


Figura 4.8: A figura mostra o comportamento das regiões de fronteira do regime Kondo molecular em função da conexão $t_{\alpha\beta}$ entre os PQ's. Estas regiões estão indicadas no diagrama da figura 4.7 e correspondem as bordas da região em vermelho destacada neste diagrama. No caso, a curva preta descreve a transição entre os regimes de $N = 0$ a $N = 1$ elétrons. Já a curva vermelha descreve a transição de $N = 1$ a $N = 2$ elétrons, na qual o sistema passa do regime Kondo molecular a um regime de interação anti-ferro entre os spins nos PQ's concorrendo com o regime Kondo.

$N = 1$, onde observamos a instalação do regime Kondo molecular. Para a entrada de um segundo elétron no sistema de PQ's é necessário uma energia adicional de

$$E_{2e} = \epsilon_0 + t_{\alpha\beta} + \frac{U - \sqrt{U^2 + 16t_{\alpha\beta}^2}}{2}, \quad (4-25)$$

que corresponde a $E_3^{2e} - E_2^{1e}$. O termo $t_{\alpha\beta} + \frac{U - \sqrt{U^2 + 16t_{\alpha\beta}^2}}{2}$ que aparece nessa expressão atua como uma interação Coulombiana efetiva U_{eff} análoga a interação U associada ao bloqueio de Coulomb no sistema de um PQ, no qual precisamos de uma energia $\epsilon_0 + U$ para adicionar um segundo elétron. Fazendo $E_{2e} = 0$ obtemos

$$\epsilon_0 = -t_{\alpha\beta} - \frac{U - \sqrt{U^2 + 16t_{\alpha\beta}^2}}{2}, \quad (4-26)$$

que corresponde a segunda interface obtida para o sistema. Esta interface é representada no diagrama pela junção entre as regiões destacadas em vermelho e amarelo, e permite descrever a transição entre o regime Kondo molecular e

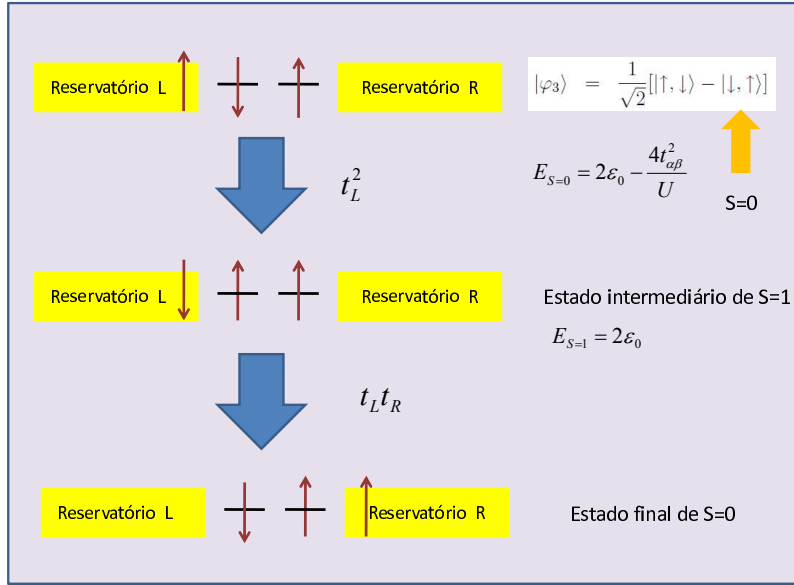


Figura 4.9: A figura mostra as transições características do regime Kondo de dois canais instalado no sistema de PQ's.

o regime anti-ferromagnético.

O interessante em se localizar as interfaces entre os regimes quânticos instalados no sistema de dois PQ's isolados está na possibilidade de extrapolar os resultados para o sistema completo da figura 4.1 e tentar entender, mesmo que de forma aproximada, a transição entre estes regimes. Na figura 4.8 apresentamos as curvas das duas interfaces que descrevemos no parágrafo anterior para uma interação Coulombiana $U = 0.5$ nos PQ's. Este resultado nos permite determinar, para diferentes conexões $t_{\alpha\beta}$, a extensão no espaço de ϵ_0 que correspondem a instalação de um determinado regime no sistema de PQ's e qual é o valor do U_{eff} no caso do efeito Kondo molecular. Além disso, permite determinar para um dado $t_{\alpha\beta}$ o valor de ϵ_0 que corresponde a interface entre dois diferentes regimes.

Analisando este resultado observamos que, para $t_{\alpha\beta} = 0.3$, por exemplo, a interface entre o regime de dois elétrons anti-ferro e o regime Kondo molecular de um elétron deveria ocorrer para $\epsilon_0 = 0.1$. Estendendo esta análise ao resultado que obtivemos na figura 4.2 para o sistema completo podemos entender a posição e a extensão dos platôs formados em $\tilde{\epsilon}_{\alpha(\beta)} = \pm t_{\alpha\beta}$, e que caracterizam o regime Kondo molecular de um e três elétrons. Nessa figura o resultado representado pela curva cinza também foi obtido para $U = 0.5$ e $t_{\alpha\beta} = 0.3$. Observamos nesta curva que a borda do platô de um elétron, que caracteriza a transição entre os regimes anti-ferro e Kondo molecular está localizada muito próximo a $Vg_{\alpha(\beta)} = 0.1$ (ou $Vg_{\alpha(\beta)}/U = 0.2$), o que concorda satisfatoriamente com a interface encontrada entre estes dois regimes

para o sistema desacoplado. Ainda na curva cinza observamos que a outra borda do platô, que caracteriza a transição do estado do vácuo ao regime Kondo molecular de um elétron, também está de acordo com o resultado esperado $\epsilon_0 = 0.3$ para o sistema desacoplado, sendo encontrada em torno de $Vg_{\alpha(\beta)}/U = 0.6$, com $U = 0.5$. As outras duas interfaces do sistema completo, que correspondem às bordas do platô de três elétrons, também concordam, por simetria, com os valores de ϵ_0 obtidos para os dois PQ's desacoplados dos reservatórios.

Um ponto importante a ser destacado é que o grau de concordância obtido para a posição das interfaces no sistema da figura 4.1 e no sistema desacoplado da figura 4.6 tende a diminuir com o valor de $t_{\alpha\beta}$ em relação a $t_{L(R)}$ e que, portanto, a determinação da posição e da extensão dos platôs de um e três elétrons obtidos para $\tilde{\epsilon}_{\alpha(\beta)} = \pm t_{\alpha\beta}$ se faz mais exata para valores relativamente grandes da conexão $t_{\alpha\beta}$ entre os PQ's. Para estes valores de $t_{\alpha\beta}$ podemos mapear o espaço dos parâmetros e distinguir de forma clara as regiões associadas a instalação dos regimes anti-ferro, Kondo molecular de um e três elétrons, e até mesmo do estado do vácuo no sistema de dois PQ's. Já para valores menores de $t_{\alpha\beta}$ a influência dos reservatórios deixa de ser desprezível para a dinâmica do sistema de modo que as conclusões extraídas através do estudo do sistema desacoplado não podem mais ser estendidas no tratamento do sistema completo da figura 4.2, nada podendo acrescentar no estudo da transição entre o regime anti-ferro e o Kondo de dois elétrons.

O regime Kondo estabelecido na região de dois elétrons para valores relativamente pequenos de $t_{\alpha\beta}$ é conhecido como efeito Kondo de dois canais e está associado a um processo que permite o transporte de elétrons entre os reservatórios. Na figura 4.9 apresentamos as etapas envolvidas nesse processo considerando a transferência de um elétron com spin para cima do reservatório L para o reservatório R e os PQ's α e β ocupados, respectivamente, com um elétron de spin para baixo e outro de spin para cima. Como podemos ver pela ilustração esta passagem se dá com a formação do estado intermediário $|\uparrow, \uparrow\rangle$ de natureza ferro, $S = 1$, e energia $E_{S=1} = 2\epsilon_0$, sendo $\epsilon_\alpha = \epsilon_\beta = \epsilon_0$. Processo análogo acontece na transferência de um elétron de spin para baixo entre os reservatórios, sendo que, neste caso, a única configuração compatível é um elétron com spin para cima no PQ α e outro com spin para baixo no PQ β com a formação do estado intermediário $|\downarrow, \downarrow\rangle$, também de natureza ferro e energia $2\epsilon_0$. Esta transição entre estados antiferro de $S = 0$ e ferro de $S = 1$ caracteriza o transporte de elétrons através do sistema de dois PQ's.

Para entender a concorrência entre o regime Kondo e a interação anti-ferro consideramos os resultados que obtivemos para os PQ's desconectados

dos reservatórios. Numa teoria de perturbação de quarta ordem a constituição do efeito Kondo requer que o estado intermediário que consiste em trocar elétrons de spins opostos entre o contato e o PQ possua a mesma energia que o estado inicial. Como podemos observar na figura 4.9 o estado de mais baixa energia para o sistema com dois elétrons é dado por $|\varphi_3\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}[|\uparrow, \downarrow\rangle - |\downarrow, \uparrow\rangle]$, que é de natureza anti-ferro, $S=0$, e possui energia $E_3 = \frac{1}{2}[4\epsilon_0 + U - \sqrt{U^2 + 16t_{\alpha\beta}^2}] \approx 2\epsilon_0 - \frac{t_{\alpha\beta}^2}{U}$. O estado intermediário de energia $E_{S=1}$ é ferro com $S_{T=1}$ e de energia maior tal que $E_{S=1} \simeq E_3 + \frac{4t_{\alpha\beta}^2}{U}$. Este fato indica que o anti-ferromagnetismo é concorrente do regime Kondo e que este só pode ser constituído no caso em que a energia ganha pelo sistema no estado Kondo, T_k , seja maior que a energia obtida na conexão anti-ferro, $T_k > \frac{4t_{\alpha\beta}^2}{U}$.

4.4.3

Nuvem e Temperatura Kondo

(i) Introdução

Os resultados que apresentamos na primeira parte são esclarecedores no sentido de nos permitir identificar as regiões no espaço dos parâmetros que correspondem a instalação de um determinado regime no sistema de dois PQ's da figura 4.1. Em especial utilizamos estes resultados para entender a física associada aos regimes Kondo de um e três elétrons caracterizadas pelas estruturas de platô em $\pm t_{\alpha\beta}$ apresentadas na figura 4.2. Através da solução exata para o sistema desacoplado conseguimos estimar as regiões onde estão as interfaces entre os diferentes regimes. Os resultados que obtivemos para esta região mostraram a concorrência entre os regimes Kondo e anti-ferro a medida que aumentamos conexão $t_{\alpha\beta}$ e permitiram, a partir do gráfico de $1 - Z^2$, por exemplo, determinar uma região aproximada em que ocorre a transição entre estes dois regimes.

Na segunda parte de resultados investigamos o comportamento da nuvem Kondo dentro dos reservatórios na transição entre os regimes Kondo e anti-ferro na região de dois elétrons. Os resultados fornecem o valor da extensão desta nuvem e da temperatura Kondo do sistema com diferentes conexões $t_{\alpha\beta}$ entre os PQ's. Estes resultados são verificados com os resultados que obtivemos a temperatura finita, em que estudamos o parâmetro de renormalização Z em função da temperatura e aproveitamos uma particularidade do método dos bósons escravos segundo a qual o sistema é desacoplado quando a temperatura aumenta. O valor da temperatura no qual isto acontece está associado com o valor da temperatura Kondo T_k (44). Observamos que a coincidência entre o valor da temperatura Kondo do sistema e a temperatura em que este é

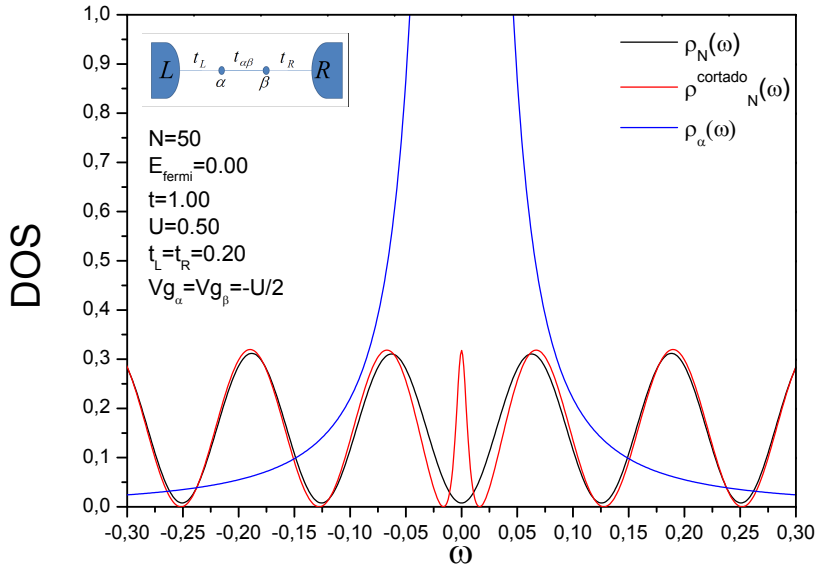


Figura 4.10: A figura mostra o efeito provocado pela presença da impureza $\alpha(\beta)$ na DOS calculada no interior do reservatório L(R). A curva preta mostra esta DOS para o sítio $N = 50$ no interior do reservatório isolado. A curva em vermelho mostra a DOS calculada neste sítio quando consideramos a conexão de cada PQ com seu respectivo reservatório. Já a curva em azul mostra a DOS no PQ $\alpha(\beta)$, que utilizamos para restringir nossa análise a região próxima ao nível de Fermi.

desacoplado ocorre somente para valores relativamente pequenos da conexão $t_{\alpha\beta}$, para os quais o regime Kondo se encontra claramente instalado no sistema.

(ii) Densidade de estados

No capítulo três discutimos que o pico Kondo na DOS de uma impureza magnética se propaga na DOS dos sítios no interior dos reservatórios de elétrons e que esta propriedade reflete a existência de uma nuvem Kondo, que se estende por estes reservatórios e cuja extensão está diretamente relacionada com a temperatura Kondo do sistema. No resultado da figura 4.10 mostramos este efeito através da DOS calculada em torno do nível de Fermi para o sítio $N = 50$, escolhido arbitrariamente no interior da semi-cadeia que representa os reservatórios. A curva preta apresentada neste gráfico corresponde a DOS calculada com os reservatórios desacoplados ², com $t_{L(R)} = 0$. Já a DOS representada pela curva em vermelho foi calculada com cada reservatório conectado a um PQ. Neste caso ainda não consideramos a conexão $t_{\alpha\beta}$ entre os PQ's. Comparando estes resultados constatamos que a conexão com a impureza magnética, aqui representada pelo PQ, modifica a DOS nos sítios

²O que pode ser conseguido para uma temperatura muito maior que a temperatura Kondo do sistema, $T \gg T_k$.

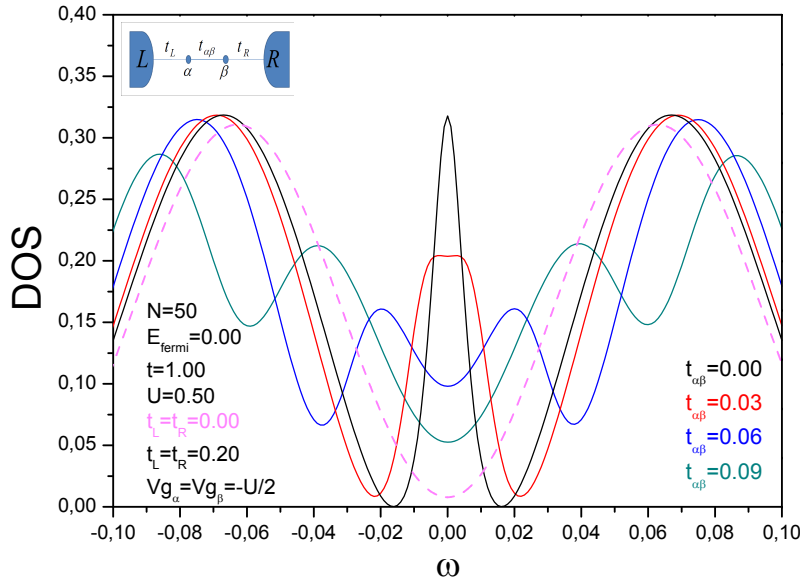


Figura 4.11: A figura mostra o efeito da interação anti-ferro entre os PQ's na DOS calculada no sítio $N = 50$ dentro dos reservatórios. A curva preta mostra a DOS calculada neste sítio para o caso em que $t_{\alpha\beta} = 0$. As curvas em vermelho, azul e cinza, são obtidas para $t_{\alpha\beta} = 0.03$, $t_{\alpha\beta} = 0.06$ e $t_{\alpha\beta} = 0.09$, respectivamente. Já a curva em rosa tracejada corresponde ao resultado da DOS para o reservatório isolado.

dentro dos reservatórios na vizinhança do nível de Fermi, neste caso com o aparecimento de uma ressonância. Vimos no capítulo em que introduzimos o conceito de nuvem Kondo que esta ressonância na DOS está relacionada a posição do sítio. Se tivéssemos considerado um sítio N ímpar a DOS seria no nível de Fermi diferente de zero no caso do reservatório isolado, e a presença do PQ se manifestaria através de uma anti-ressonância nesta DOS. A curva em azul mostrada neste gráfico corresponde a DOS calculada no PQ que utilizamos na definição da função extensão da nuvem Kondo $F(N)$ (equação 4-15) para eliminar as oscilações de Friedel e restringir os efeitos provocados pela presença da impureza na região em torno do nível de Fermi durante o estudo da estrutura da nuvem e da temperatura Kondo do sistema.

Os resultados apresentados na figura 4.11 mostram o comportamento da DOS calculada no interior dos reservatórios como consequência da competição entre a interação anti-ferro e o regime Kondo estabelecido no sistema. Em particular escolhemos o sítio $N = 50$ e investigamos a DOS calculada neste sítio para diferentes valores da conexão $t_{\alpha\beta}$ entre os PQ's. Nesta figura a curva rosa tracejada corresponde a DOS calculada para os reservatórios isolados e a preta considerando a conexão destes reservatórios com cada um dos PQ's, ainda com $t_{\alpha\beta} = 0$. A ressonância obtida no nível de Fermi para a DOS representada pela curva preta corresponde a forma como a presença do estado

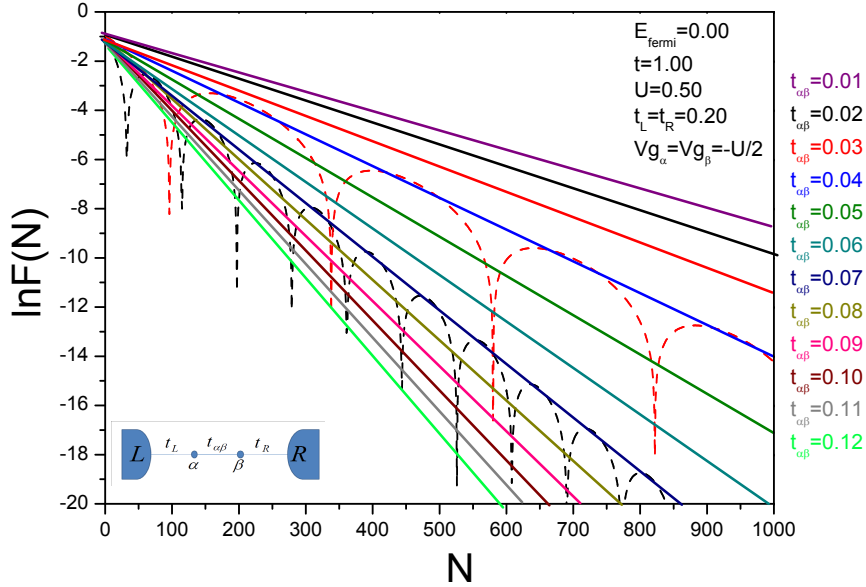


Figura 4.12: A figura mostra as retas que tangenciam a função $\ln F(N)$ para diferentes valores da conexão $t_{\alpha\beta}$ entre os PQ's. A inclinação dessas retas nos fornece a temperatura Kondo do sistema para estas conexões.

Kondo, formado pelo acoplamento dos spins dos elétrons nos PQ's com os spins dos elétrons de condução nos reservatórios, se manifesta na DOS calculada dentro dos reservatórios.

Observamos a partir das curvas em vermelho, azul e cinza, obtidas respectivamente para $t_{\alpha\beta} = 0.03$, $t_{\alpha\beta} = 0.06$ e $t_{\alpha\beta} = 0.09$, que a destruição deste estado com o aumento da interação anti-ferro $J = \frac{4t_{\alpha\beta}^2}{U}$ entre os spins dos elétrons nos PQ's se reflete no desaparecimento dessa ressonância no nível de Fermi, com a DOS no sítio $N = 50$ se aproximando da DOS calculada para este sítio dentro dos reservatórios isolados. Nos resultados a seguir veremos que este efeito está relacionado ao aumento da temperatura Kondo do sistema com o valor da conexão $t_{\alpha\beta}$ e a consequente destruição da nuvem Kondo dentro dos reservatórios.

Finalizando as considerações sobre este resultado comentamos que se estivéssemos analisando a DOS num sítio ímpar no interior dos reservatórios, $N = 49$, por exemplo, o efeito provocado pelo aumento da interação anti-ferro J e a consequente destruição do regime Kondo seria a recomposição da anti-ressonância obtida no nível de Fermi para a DOS calculada neste sítio.

(iii) Extensão da Nuvem e Temperatura Kondo

O resultado da figura 4.12 é obtido a partir de um estudo da função $F(N)$ que descrevemos no início deste capítulo e que está associada a extensão

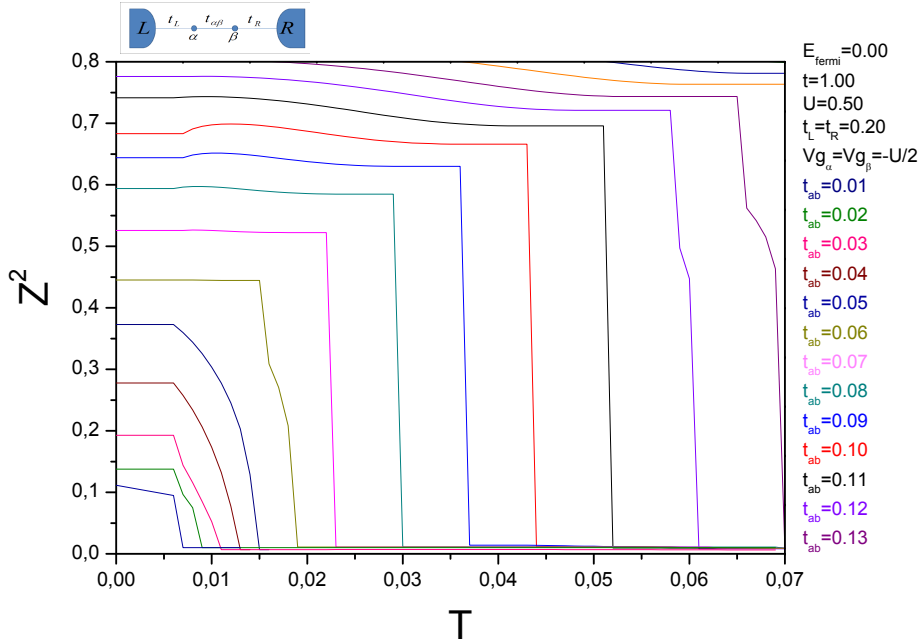


Figura 4.13: A figura mostra o comportamento do parâmetro de renormalização Z^2 em função da temperatura para o sistema de dois PQ's com diferentes valores da conexão $t_{\alpha\beta}$ entre os PQ's.

da nuvem Kondo dentro dos reservatórios de elétrons. Diferentemente do que obtivemos no capítulo anterior, quando tratamos o problema da nuvem Kondo no sistema de um PQ ligado a um contato metálico, no sistema de dois PQ's conectados esta função apresenta um comportamento oscilatório com um envoltório exponencial que controla a extensão da nuvem.

A forma conveniente que encontramos para explorar a informação física contida em $F(N)$ é considerar as retas que tangenciam o logaritmo desta função. Na figura 4.12 mostramos a curva da função $\ln F(N)$ para dois diferentes valores de $t_{\alpha\beta}$, no caso $t_{\alpha\beta} = 0.04$ e $t_{\alpha\beta} = 0.07$, e também as retas tangentes a essas curvas. A inclinação dessas retas são proporcionais a temperatura Kondo T_k do sistema para os valores de $t_{\alpha\beta}$ considerados e nos permite obter, a menos de uma constante, a extensão ξ da nuvem Kondo no interior dos reservatórios através da expressão $\xi = \frac{\gamma}{T_k}$. As demais retas mostradas na figura também são tangentes a função $\ln F(N)$ e fornecem a extensão da nuvem e a temperatura Kondo do sistema para diversos valores da conexão entre os PQ's. Os valores que obtivemos para a temperatura Kondo T_k do sistema através da inclinação das retas tangentes são representados pela curva preta no gráfico da figura 4.14 em função da conexão $t_{\alpha\beta}$ entre os PQ's.

No sentido de comparar e dar confiabilidade aos resultados que obtivemos para a temperatura Kondo T_k do sistema através do estudo da nuvem Kondo dentro dos reservatórios exploramos uma particularidade do método dos bósons escravos, segundo a qual o sistema, inicialmente no regime Kondo para $T = 0$, é

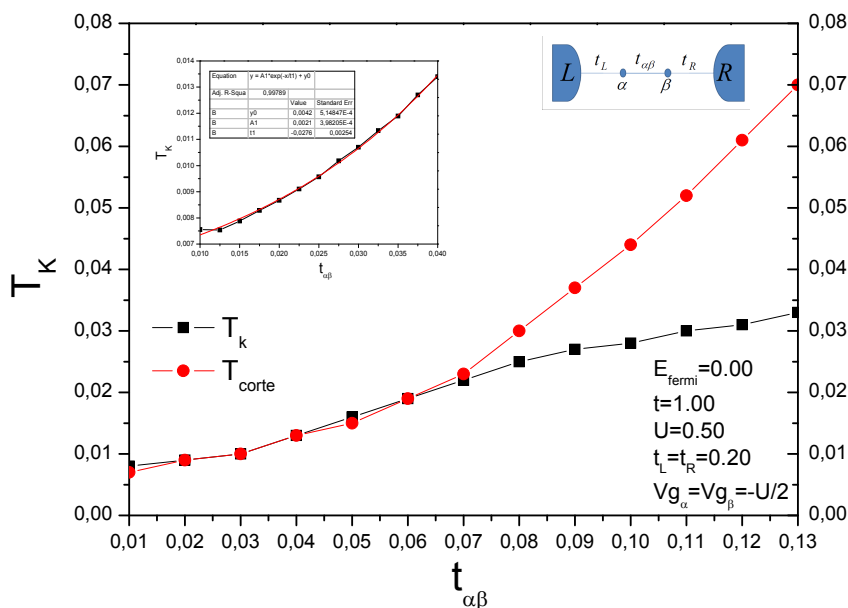


Figura 4.14: A figura mostra uma comparação entre a temperatura Kondo obtida a partir da inclinação das retas tangentes a $\ln F(N)$ e a temperatura T para a qual o parâmetro $Z^2 \rightarrow 0$ e o sistema é desacoplado dos reservatórios.

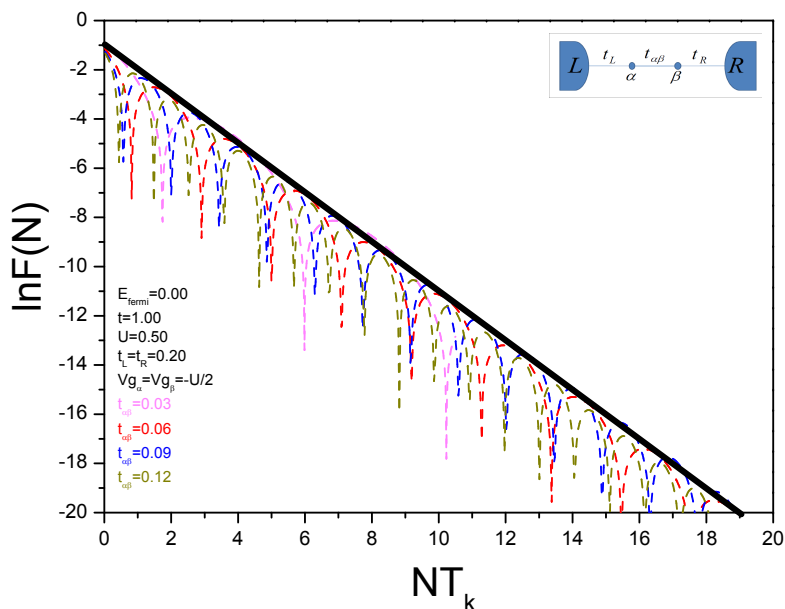


Figura 4.15: A figura mostra uma curva universal obtida para o logaritmo da função $F(N)$. Esta curva nos revela, de certa forma, o caráter universal da física do sistema associada ao efeito Kondo.

desacoplado quando sua temperatura atinge o valor da ordem da temperatura Kondo. Este desacoplamento se dá através do parâmetro Z que renormaliza as conexões e que tende a zero quando $T \sim T_K$. No resultado da figura 4.13 apresentamos um estudo de Z^2 em função da temperatura para diferentes valores de $t_{\alpha\beta}$ onde mostramos claramente que o sistema é desacoplado quando sua temperatura atinge um determinado valor, que chamamos de temperatura de corte T_{corte} . Os valores de T_{corte} obtidos para diferentes magnitudes da conexão $t_{\alpha\beta}$ entre os PQ's são representados pela curva vermelha na figura 4.14 e comparados com os resultados que obtivemos para a temperatura Kondo T_k do sistema através das inclinações das retas tangentes a $\ln F(N)$. Os gráficos mostraram concordância total entre T_k e T_{corte} para $t_{\alpha\beta} < 0.07$, na região em que o sistema se encontra claramente no regime Kondo. Na ampliação mostrada na figura apresentamos um estudo mais detalhado de T_k dentro desta região, mais especificamente para $t_{\alpha\beta} < 0.04$, onde obtivemos que a temperatura Kondo T_k descreve uma exponencial em relação ao valor $t_{\alpha\beta}$, semelhante em termos funcionais com os resultados obtidos no estudo de uma molécula de dois PQ's usando o métodos dos bósons escravos no limite $U \rightarrow \infty$ (45). Ainda nesta figura obtivemos que, a partir de $t_{\alpha\beta} > 0.07$, a medida que aumentamos o valor desta conexão o valor de temperatura T_{corte} para o qual o sistema é desacoplado se afasta cada vez mais do valor que corresponde a temperatura Kondo T_k do sistema. Este valor de $t_{\alpha\beta}$ é tal que $\frac{4t_{\alpha\beta}^2}{U} > T_k$ quando o sistema sai do regime Kondo.

4.4.4 Conclusões

A importância na abordagem do efeito Kondo através da extensão da nuvem Kondo dentro dos reservatórios proposto no capítulo (4) está na possibilidade de se obter a temperatura Kondo T_k do sistema a partir de $T_k = \frac{\gamma}{\xi}$, onde a constante γ pode ser obtida se compararmos os resultados de T_k com os obtidos para a temperatura de corte do sistema dentro da região Kondo, por exemplo. No resultado da figura 4.12 mostramos através das retas tangentes a $\ln F(N)$ que a temperatura Kondo do sistema aumenta com o valor de $t_{\alpha\beta}$ entre os PQ's, ao mesmo tempo que diminui a extensão da nuvem Kondo dentro dos reservatórios. Com esse resultado mostramos a destruição da nuvem Kondo dentro dos reservatórios com o aumento da interação $J = \frac{4t_{\alpha\beta}^2}{U}$ entre os PQ's e a transição do sistema ao regime molecular. Obtivemos também que esta transição é caracterizada pela temperatura Kondo T_k do sistema, que identificamos como a escala de energia que define o estabelecimento do regime Kondo no sistema. Terminamos o capítulo apresentado o resultado da

figura 4.15, em que apresentamos as curvas tangentes a $\ln F(N)$ para quatro diferentes valores de $t_{\alpha\beta}$ em função de NT_k . Este resultado mostra o caráter universal do regime Kondo de PQ's e confirma a temperatura Kondo T_k como o única escala de energia associada ao estabelecimento deste regime no sistema de PQ's. Este estudo foi possível de ser feito, sem acrescentar uma interação anti-ferro artificial entre os PQ's, usando o método dos bósons escravos para U finito que não elimina a interação magnética entre os spins. Este estudo define um conjunto de elementos conceituais para a compreensão da interação RKKY entre dois PQ's a uma distância arbitrária e suas consequências nas propriedades de transporte destes sistemas.

5

Efeito Kondo e correlação eletrônica num sistema de três PQ's conectados em série

5.1

Introdução

No capítulo anterior estudamos a concorrência entre a correlação anti-ferro entre dois PQ's e o regime Kondo que surge quando eles além de interagir diretamente entre si estão conectados a contatos elétricos. Neste capítulo o objetivo é o estudo novamente da concorrência entre a interação magnética entre os PQ's e o efeito Kondo e seus efeitos no transporte de elétrons mas neste caso quando a correlação entre seus spins pode ser manipulada da anti-ferro para a ferro. Como já analisamos no capítulo da porta quântica isto pode ser obtido quando a interação entre os PQ's é mediada por um terceiro sítio cujo estado de carga é manipulado por um potencial de porta. Esta situação nos aproxima a da interação RKKY entre impurezas magnéticas diluídas numa matriz metálica. Esta interação é oscilante ferro e anti-ferro e assintoticamente se comporta com $\cos(2\pi K_f r)/r^d$ onde K_f é o momento de Fermi, r a distância entre os spins e d a dimensão do sistema(75). Estudamos

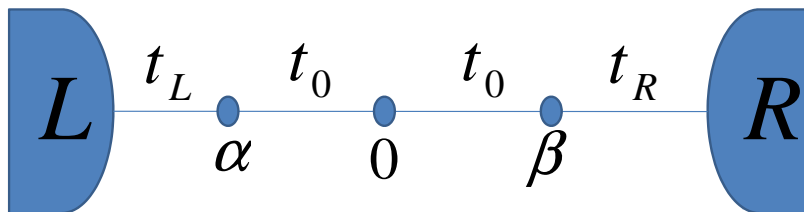


Figura 5.1: A figura mostra uma molécula artificial que consiste de dois PQ's, α e β , conectados a contatos metálicos e indiretamente ligados entre si através de suas respectivas conexões com um terceiro PQ 0.

assim a relação entre o efeito Kondo e as interações ferro e anti-ferro num sistema de três PQ's, com dois PQ's interagentes α e β conectados entre si através de um terceiro PQ não interagente 0. Os PQ's α e β são conectados a um reservatório de elétrons formando o sistema da figura 5.1. A física subjacente ao efeito Kondo é incorporada ao sistema a partir do método dos bósons escravos a U finito e a presença, ou não, desse regime é observada através dos valores das grandezas calculadas em função dos parâmetros que definem sistema. Esses parâmetros correspondem ao valor do potencial de porta aplicado na base dos PQ's e das conexões entre as diferentes partes do sistema. No que se refere às grandezas físicas, estudamos o comportamento da DOS calculada nos PQ's interagentes e da condutância através do sistema. No contexto do formalismo dos bósons escravos estudamos o comportamento do nível de energia renormalizado nos PQ's interagentes e do parâmetro de renormalização Z^2 em função do potencial de porta aplicado nos PQ's interagentes e não interagente. Investigamos ainda o comportamento desse parâmetro com o aumento da temperatura e aproveitamos esse estudo para estimar o valor da temperatura Kondo do sistema. Como alternativa para o cálculo da temperatura Kondo passamos a considerar o efeito causado pela presença do estado Kondo nas DOS calculadas em torno do nível de Fermi para sítios dentro dos reservatórios de elétrons. A partir desse estudo estimamos a extensão da nuvem Kondo e o valor da temperatura Kondo para diferentes valores dos parâmetros que definem o sistema.

5.2

Método dos bósons escravos

O sistema de três PQ's que iremos tratar é descrito pelo Hamiltoniano

$$\begin{aligned}
 H = & \sum_{i=\alpha,\beta,0} \epsilon_i n_{i\sigma} + \sum_{i=\alpha,\beta} U_i n_{i\sigma} n_{i\bar{\sigma}} + \sum_{\sigma} t_L (c_{L\sigma}^{\dagger} c_{\alpha\sigma} + c_{\alpha\sigma}^{\dagger} c_{L\sigma}) + \sum_{\sigma} t_R (c_{R\sigma}^{\dagger} c_{\beta\sigma} + c_{\beta\sigma}^{\dagger} c_{R\sigma}) + \\
 & + \sum_{\sigma} t' (c_{\alpha\sigma}^{\dagger} c_{0\sigma} + c_{0\sigma}^{\dagger} c_{\alpha\sigma}) + \sum_{\sigma} t' (c_{\beta\sigma}^{\dagger} c_{0\sigma} + c_{0\sigma}^{\dagger} c_{\beta\sigma}) + \sum_{\sigma}^{i=-1} t (c_{i\sigma}^{\dagger} c_{i-1\sigma} + c_{i-1\sigma}^{\dagger} c_{i\sigma}) + \\
 & + \sum_{\sigma}^{i=1} t (c_{i\sigma}^{\dagger} c_{i+1\sigma} + c_{i+1\sigma}^{\dagger} c_{i\sigma}), \tag{5-1}
 \end{aligned}$$

onde ϵ_i , com $(i = \alpha, \beta, 0)$, descreve o nível do estado local nos PQ's, U a repulsão Coulombiana nos PQ's interagentes α e β , $t_{L(R)}$ a conexão destes PQ's com os reservatórios de elétrons e t_0 a conexão com um terceiro PQ não interagente. O formalismo dos bósons escravos, como sabemos, introduz renormalizações que modificam os valores iniciais desses parâmetros de modo

a levar o sistema ao regime Kondo. Para este caso o Hamiltoniano do sistema fica escrito como

$$\begin{aligned}
 H_{eff} = & \sum_{\substack{i=\alpha,\beta,0 \\ \sigma}} \epsilon_i n_{i\sigma} + \sum_{i=\alpha,\beta} \langle d_{i\sigma} \rangle^2 + \sum_{\sigma} t_L Z (c_{L\sigma}^\dagger c_{\alpha\sigma} + c_{\alpha\sigma}^\dagger c_{L\sigma}) + \\
 & + \sum_{\sigma} t_R Z (c_{R\sigma}^\dagger c_{\beta\sigma} + c_{\beta\sigma}^\dagger c_{R\sigma}) + \sum_{\sigma} t_0 Z (c_{\alpha\sigma}^\dagger c_{0\sigma} + c_{0\sigma}^\dagger c_{\alpha\sigma}) + \\
 & + \sum_{\sigma} t_0 Z (c_{\beta\sigma}^\dagger c_{0\sigma} + c_{0\sigma}^\dagger c_{\beta\sigma}) + \sum_{\substack{i=\alpha,\beta, \\ \sigma}} \lambda_1^i (\langle e_i \rangle^2 + \langle p_{i\sigma} \rangle^2 + \langle d_i \rangle^2 - 1) + \\
 & + \sum_{\substack{i=\alpha,\beta \\ \sigma}} \lambda_{2\sigma}^i (c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma} - \langle p_{i\sigma} \rangle^2 - \langle d_i \rangle^2) + \sum_{\substack{i=-1 \\ \sigma}}^{-\infty} t (c_{i\sigma}^\dagger c_{i-1\sigma} + c_{i-1\sigma}^\dagger c_{i\sigma}) + \\
 & + \sum_{\substack{i=1 \\ \sigma}}^{\infty} t (c_{i\sigma}^\dagger c_{i+1\sigma} + c_{i+1\sigma}^\dagger c_{i\sigma}), \tag{5-2}
 \end{aligned}$$

onde a física associada ao regime Kondo é incorporada através dos multiplicadores de Lagrange λ_1^i e $\lambda_{2\sigma}^i$ e dos valores médios dos bósons escravos e_i , $p_{i\sigma}$ e d_i , com $i = \alpha, \beta$. A partir deste Hamiltoniano podemos escrever a expressão para a energia livre F do sistema. Minimizando esta energia em relação aos bósons escravos e ao multiplicadores de Lagrange, de acordo com o teorema de Hellman Feynman, de forma semelhante a como foi feito nos outros capítulos, obtemos o sistema não linear

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial F}{\partial \langle e_\alpha \rangle} &= \sum_{\sigma} t_L \frac{\partial Z}{\partial \langle e_\alpha \rangle} (c_{L\sigma}^\dagger c_{\alpha\sigma} + c_{\alpha\sigma}^\dagger c_{L\sigma}) + \sum_{\sigma} t_0 \frac{\partial Z}{\partial \langle e_\alpha \rangle} (c_{\alpha\sigma}^\dagger c_{0\sigma} + c_{0\sigma}^\dagger c_{\alpha\sigma}) + 2\lambda_1^\alpha \langle e_\alpha \rangle = 0 \\
 \frac{\partial F}{\partial \langle p_{\alpha\sigma} \rangle} &= t_L \frac{\partial Z}{\partial \langle p_{\alpha\sigma} \rangle} (c_{L\sigma}^\dagger c_{\alpha\sigma} + c_{\alpha\sigma}^\dagger c_{L\sigma}) + t_0 \frac{\partial Z}{\partial \langle p_{\alpha\sigma} \rangle} (c_{\alpha\sigma}^\dagger c_{0\sigma} + c_{0\sigma}^\dagger c_{\alpha\sigma}) + 2(\lambda_1^\alpha - \lambda_{2\sigma}^\alpha) \langle p_{\alpha\sigma} \rangle = 0 \\
 \frac{\partial F}{\partial \langle d_\alpha \rangle} &= \sum_{\sigma} t_L \frac{\partial Z}{\partial \langle d_\alpha \rangle} (c_{L\sigma}^\dagger c_{\alpha\sigma} + c_{\alpha\sigma}^\dagger c_{L\sigma}) + \sum_{\sigma} t_0 \frac{\partial Z}{\partial \langle d_\alpha \rangle} (c_{\alpha\sigma}^\dagger c_{0\sigma} + c_{0\sigma}^\dagger c_{\alpha\sigma}) + \\
 & + 2(U + \lambda_1^\alpha - \lambda_{2\sigma}^\alpha - \lambda_{2\bar{\sigma}}^\alpha) \langle d_\alpha \rangle = 0 \\
 \frac{\partial F}{\partial \lambda_1^\alpha} &= \langle e_\alpha \rangle^2 + \sum_{\sigma} \langle p_{\alpha\sigma} \rangle^2 + \langle d_\alpha \rangle^2 - 1 = 0 \\
 \frac{\partial F}{\partial \lambda_{2\sigma}^\alpha} &= n_{\alpha\sigma}^\dagger - \langle p_{\alpha\sigma} \rangle^2 - \langle d_\alpha \rangle^2 = 0,
 \end{aligned}$$

cuja solução fornece os multiplicadores de Lagrange λ_1^i e $\lambda_{2\sigma}^i$ e os valores médios $\langle e_i \rangle$, $\langle p_{i\sigma} \rangle$ e $\langle d_i \rangle$ dos bósons escravos, com $i = \alpha, \beta$.

5.3 Funções de Green

Os valores médios $\langle c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} \rangle$ que aparecem no sistema não linear da seção anterior são obtidos de forma auto-consistente a partir das funções de Green

G_{ij}^σ , que estão associadas a ocupação dos PQ's ($i = j$) e a propagação de elétrons entre as diferentes partes do sistema ($i \neq j$). Começamos por apresentar as funções de Green locais

$$G_{00}^\sigma = \frac{g_{0\sigma}}{1 - t_0^2 g_{0\sigma} (\tilde{g}_{\alpha\sigma} + \tilde{g}_{\beta\sigma})} \quad (5-3)$$

e

$$G_{\alpha\alpha(\beta\beta)}^\sigma = \frac{(1 - t_0^2 g_{0\sigma} \tilde{g}_{\beta(\alpha)\sigma}) \tilde{g}_{\alpha(\beta)\sigma}}{1 - t_0^2 g_{0\sigma} (\tilde{g}_{\alpha\sigma} + \tilde{g}_{\beta\sigma})}. \quad (5-4)$$

Essas funções incorporam a física de todo o sistema nos PQ's 0 e $\alpha(\beta)$, respectivamente, e são resultado de uma expansão diagramática envolvendo a função de Green de um corpo $g_{0\sigma}$ do PQ central e a função $\tilde{g}_{\alpha(\beta)\sigma}$, que descreve o PQ $\alpha(\beta)$ conectado ao reservatório $L(R)$. Integrando a parte imaginária de G_{00}^σ e $G_{\alpha\alpha(\beta\beta)}^\sigma$ obtemos o valor das cargas $\langle c_{0\sigma}^\dagger c_{0\sigma} \rangle$ e $\langle c_{\alpha(\beta)\sigma}^\dagger c_{\alpha(\beta)\sigma} \rangle$ nos PQ's 0 e $\alpha(\beta)$, respectivamente, sendo necessário um processo auto-consistente no caso dos PQ's interagentes. Para encontrar os valores médios $\langle c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} \rangle$, com $i \neq j$, que aparecem no sistema de equações precisamos das funções de Green não locais

$$G_{0\alpha(\beta)}^\sigma = \frac{g_{0\sigma} t_0 \tilde{g}_{\alpha(\beta)\sigma}}{1 - t_0^2 g_{0\sigma} (\tilde{g}_{\alpha\sigma} + \tilde{g}_{\beta\sigma})}, \quad (5-5)$$

e

$$G_{L\alpha(R)\beta}^\sigma = \frac{\tilde{g}_{L(R)} t_{L(R)} (1 - t_0^2 g_{0\sigma} \tilde{g}_{\beta(\alpha)\sigma}) \tilde{g}_{\alpha(\beta)\sigma}}{1 - t_0^2 g_{0\sigma} (\tilde{g}_{\alpha\sigma} + \tilde{g}_{\beta\sigma})}, \quad (5-6)$$

que são associadas a propagação de elétrons do sítio central para o PQ $\alpha(\beta)$ e entre este PQ e o reservatório $L(R)$, respectivamente. Além de fornecer os valores médios $\langle c_{0\sigma}^\dagger c_{\alpha(\beta)\sigma} \rangle$ e $\langle c_{L(R)\sigma}^\dagger c_{\alpha(\beta)\sigma} \rangle$ estas funções podem ser utilizadas no cálculo da condutância G através do sistema. Outra que pode ser utilizada no cálculo da condutância é a função

$$G_{\alpha\beta}^\sigma = \frac{\tilde{g}_{\alpha\sigma} t_0 g_{0\sigma} t_0 \tilde{g}_{\beta\sigma}}{1 - t_0^2 g_{0\sigma} (\tilde{g}_{\alpha\sigma} + \tilde{g}_{\beta\sigma})}, \quad (5-7)$$

associada a propagação de elétrons entre os PQ's α e β . De fato, utilizando esta função a expressão para a condutância fica idêntica a equação 4.7 obtida no capítulo anterior para o sistema de dois PQ's.

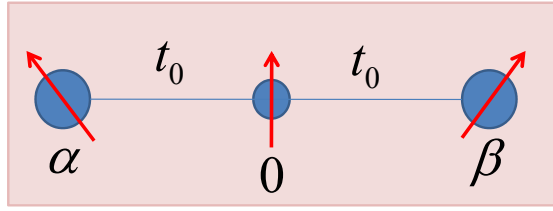


Figura 5.2: A figura mostra o sistema de três PQ's isolados com os PQ's interagentes α e β conectados em série ao PQ 0 não interagente.

5.4

Sistema de três PQ's (solução exata).

A proposta central deste capítulo é investigar os diferentes regimes quânticos instalados na molécula de três PQ's da figura 5.1 em função dos parâmetros que a definem, como o valor das conexões e a posição do nível de energia local em cada um dos PQ's. Estes parâmetros são controlados através da aplicação de potenciais elétricos nas respectivas partes do sistema, sendo os regimes quânticos determinados pela magnitude desses potenciais. No início deste trabalho ajustamos em $Vg_{\alpha\beta} = -U/2$, com $U = 0.5$, o potencial de porta aplicado nos PQ's laterais, em $t_{L(R)} = 0.2$ a conexão com os reservatórios, e estudamos as propriedades do sistema em função do potencial de porta Vg_0 aplicado na base do PQ central para diferentes valores da conexão t_0 entre os PQ's. Mais especificamente investigamos as regiões do espaço dos parâmetros que correspondem a instalação do regime Kondo no sistema e analisamos o processo de concorrência, ou até mesmo a possibilidade de coexistência, entre este regime e os regimes ferro e anti-ferro que podem estar presentes e que dependem do número de elétrons no sistema de PQ's.

Antes de apresentar os resultados que obtivemos para o sistema da figura 5.1 vamos desconsiderar a conexão $t_{L(R)}$ com os contatos metálicos e encontrar de forma exata a solução para o sistema de três PQ's isolados que aparece representado na figura 5.2. A solução para este problema mais simples nos permite determinar a natureza da correlação $S_\alpha S_\beta$ entre os spins dos elétrons nos PQ's laterais para o sistema com um número N de partículas e nos ajuda a identificar no sistema completo qual dos regimes, ferro ou anti-ferro, coexiste e qual concorre com o regime Kondo. Para este estudo o sistema é preparado de forma idêntica a que descrevemos no parágrafo anterior. Assim, como $Vg_{\alpha\beta} = -U/2$ a ocupação desses PQ's é fixada em um elétron cada devido ao bloqueio de Coulomb e o número de partículas no sistema passa a depender somente do estado de carga do PQ central, controlado pelo potencial

de porta Vg_0 aplicado na base desse PQ. Em particular obtemos as soluções para $N = 2$ e $N = 3$ elétrons e investigamos a natureza dessas soluções no que se refere a orientação relativa entre os spins dos elétrons nos PQ's α e β . As soluções para o sistema com três e quatro elétrons, respectivamente, são idênticas a estas, por simetria.

O sistema desacoplado da figura 5.2 é descrito pelo Hamiltoniano

$$H = \sum_{\substack{i=\alpha,\beta,0 \\ \sigma}} \epsilon_i n_{i\sigma} + \sum_{i=\alpha,\beta} U_i n_{i\sigma} n_{i\bar{\sigma}} + \sum_{\substack{i=\alpha,\beta \\ \sigma}} t_0 (c_{i\sigma}^\dagger c_{0\sigma} + c_{0\sigma}^\dagger c_{i\sigma}), \quad (5-8)$$

onde $c_{i\sigma}^\dagger$ ($c_{i\sigma}$) são operadores responsáveis pela criação(destruição) de um elétron no sítio i , com $i = \alpha, 0, \beta$, e t_0 a conexão entre os PQ's. Esse Hamiltoniano pode ser diagonalizado para um número N de elétrons e nos fornece a solução exata para o sistema de três PQ's isolados. Escrita numa base adequada a matriz que representa este Hamiltoniano pode ser separada em blocos de spin total $S_T = 1$ e $S_T = 0$, associados, respectivamente, as correlações ferro e anti-ferro entre os spins dos elétrons nos PQ's laterais. Esses blocos podem ser diagonalizados separadamente e fornecem como resultado os níveis de energia dos estados ferro e anti-ferro do sistema de PQ's. Assim, para $N = 2$ elétrons, definimos uma base composta pelos estados de natureza ferro

$$\varphi_1^{F(2e)} = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow, 0, \downarrow \rangle + |\downarrow, 0, \uparrow \rangle) \quad (5-9)$$

$$\varphi_2^{F(2e)} = \frac{1}{2} [|0, \uparrow, \downarrow \rangle + |\uparrow, \downarrow, 0 \rangle + (|0, \downarrow, \uparrow \rangle + |\downarrow, \uparrow, 0 \rangle)], \quad (5-10)$$

e anti-ferro

$$\varphi_1^{AF(2e)} = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow, 0, \downarrow \rangle - |\downarrow, 0, \uparrow \rangle) \quad (5-11)$$

$$\varphi_2^{AF(2e)} = \frac{1}{2} [|0, \uparrow, \downarrow \rangle + |\uparrow, \downarrow, 0 \rangle - (|0, \downarrow, \uparrow \rangle + |\downarrow, \uparrow, 0 \rangle)] \quad (5-12)$$

$$\varphi_3^{AF(2e)} = \frac{1}{2} |0, \uparrow\downarrow, 0 \rangle \quad (5-13)$$

$$\varphi_4^{AF(2e)} = \frac{1}{\sqrt{2}} (|0, 0, \uparrow\downarrow \rangle + |\uparrow\downarrow, 0, 0 \rangle). \quad (5-14)$$

Escrito nessa base o Hamiltoniano do sistema pode ser dividido nos blocos

$$H_{(2e)}^F = \begin{pmatrix} \epsilon_\alpha + \epsilon_\beta & \sqrt{2}t_0 \\ \sqrt{2}t_0 & \epsilon_0 + \frac{1}{2}(\epsilon_\alpha + \epsilon_\beta) \end{pmatrix}$$

e

$$H_{(2e)}^{AF} = \begin{pmatrix} \epsilon_\alpha + \epsilon_\beta & \sqrt{2}t_0 & 0 & 0 \\ \sqrt{2}t_0 & \epsilon_0 + \frac{1}{2}(\epsilon_\alpha + \epsilon_\beta) & 2t_0 & \sqrt{2}t_0 \\ 0 & 2t_0 & \epsilon_0 & 0 \\ 0 & \sqrt{2}t_0 & 0 & \epsilon_\alpha + \epsilon_\beta + U \end{pmatrix},$$

que, diagonalizados, fornecem de forma exata as soluções ferro e anti-ferro, respectivamente, para o sistema de PQ's com dois elétrons. Para o sistema com $N = 3$ elétrons definimos uma base composta pelos estados ferro

$$\varphi_1^{F(3e)} = \frac{1}{\sqrt{6}}(|\uparrow, \downarrow, \uparrow\rangle - |\uparrow, \uparrow, \downarrow\rangle - |\downarrow, \uparrow, \uparrow\rangle) \quad (5-15)$$

$$\varphi_2^{F(3e)} = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0, \uparrow\downarrow, \uparrow\rangle - |\uparrow, \uparrow\downarrow, 0\rangle) \quad (5-16)$$

$$\varphi_3^{F(3e)} = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow, 0, \uparrow\downarrow\rangle - |\uparrow\downarrow, 0, \uparrow\rangle) \quad (5-17)$$

$$\varphi_4^{F(3e)} = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0, \uparrow, \uparrow\downarrow\rangle - |\uparrow\downarrow, \uparrow, 0\rangle), \quad (5-18)$$

e anti-ferro

$$\varphi_1^{AF(3e)} = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow, \uparrow, \uparrow\rangle - |\downarrow, \uparrow, \uparrow\rangle) \quad (5-19)$$

$$\varphi_2^{AF(3e)} = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow, 0, \uparrow\downarrow\rangle + |\uparrow\downarrow, 0, \uparrow\rangle) \quad (5-20)$$

$$\varphi_3^{AF(3e)} = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow, \uparrow\downarrow, 0\rangle - |0, \uparrow\downarrow, \uparrow\rangle) \quad (5-21)$$

$$\varphi_4^{AF(3e)} = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0, \uparrow, \uparrow\downarrow\rangle + |\uparrow\downarrow, \uparrow, 0\rangle). \quad (5-22)$$

Escrevendo o Hamiltoniano nesta base separamos os blocos

$$H_{(3e)}^F = \begin{pmatrix} \epsilon_\alpha + \epsilon_\beta + \epsilon_0 & \sqrt{3}t_0 & -\sqrt{3}t_0 & 0 \\ \sqrt{3}t_0 & 2\epsilon_0 + \frac{1}{2}(\epsilon_\alpha + \epsilon_\beta) & 0 & -t_0 \\ -\sqrt{3}t_0 & 0 & \frac{3}{2}(\epsilon_\alpha + \epsilon_\beta) + U & t_0 \\ 0 & -t_0 & t_0 & \epsilon_\alpha + \epsilon_\beta + \epsilon_0 + U \end{pmatrix},$$

e

$$H_{(3e)}^{AF} = \begin{pmatrix} \epsilon_\alpha + \epsilon_\beta + \epsilon_0 & t_0 & t_0 & 0 \\ t_0 & \frac{3}{2}(\epsilon_\alpha + \epsilon_\beta) + U & 0 & t_0 \\ t_0 & 0 & 2\epsilon_0 + \frac{1}{2}(\epsilon_\alpha + \epsilon_\beta) & -t_0 \\ 0 & t_0 & -t_0 & \epsilon_\alpha + \epsilon_\beta + \epsilon_0 + U \end{pmatrix}.$$

que podem ser diagonalizados e fornecem de forma exata as soluções ferro e anti-ferro, respectivamente, para o sistema de PQ's com três elétrons.

As soluções ferro e anti-ferro para o sistema com dois e três elétrons são apresentadas na figura 5.3 em função do potencial de porta Vg_0 aplicado na base do PQ central e para quatro diferentes magnitudes da conexão t_0 , no caso $t_0 = 0.1; 0.2; \dots; 0.4$. Comparando a curva preta com a vermelha e a curva azul com a cinza em cada um dos quadrantes desta figura observamos que o sistema é sempre anti-ferro com dois elétrons e ferro com três elétrons. Observamos também que as soluções ferro e anti-ferro tendem a colapsar para valores relativamente grandes do potencial Vg_0 . Este comportamento está associado a existência de uma conexão efetiva $\tilde{t}_{\alpha\beta}$ entre os PQ's α e β que tende a se anular para esses valores de Vg_0 e tornar os PQ's independentes.

A expressão para $\tilde{t}_{\alpha\beta}$ pode ser obtida pela comparação entre as funções de Green $G_{\alpha\alpha}^\sigma$ para o sistema com os PQ's α e β conectados de forma indireta através do sítio central e a que se obtém através de uma conexão efetiva entre estes PQ's. Para o sistema da figura 5.2 essa função pode ser escrita como

$$G_{\alpha\alpha}^\sigma = g_{\alpha\sigma} + g_{\alpha\sigma}t_0G_{0\alpha}^\sigma, \quad (5-23)$$

onde, por sua vez,

$$G_{0\alpha}^\sigma = g_{0\sigma}t_0G_{\alpha\alpha}^\sigma + g_{0\sigma}t_0G_{\beta\alpha}^\sigma. \quad (5-24)$$

Substituindo 5-24 em 5-23 obtemos a expressão

$$G_{\alpha\alpha}^\sigma = \frac{g_{\alpha\sigma}}{1 - t_0^2 g_{0\sigma} g_{\alpha\sigma}} + \frac{g_{\alpha\sigma}}{1 - t_0^2 g_{0\sigma} g_{\alpha\sigma}} t_0 g_{0\sigma} t_0 G_{\beta\alpha}^\sigma, \quad (5-25)$$

que, comparada com

$$G_{\alpha\alpha}^\sigma = g_{\alpha\sigma} + g_{\alpha\sigma} \tilde{t}_{\alpha\beta} G_{\beta\alpha}^\sigma, \quad (5-26)$$

obtida para os PQ's conectados diretamente através de $t_{\alpha\beta}$, nos permite identificar a função de Green renormalizada

$$\tilde{g}_{\alpha\sigma} = \frac{g_{\alpha\sigma}}{1 - t_0^2 g_{0\sigma} g_{\alpha\sigma}} \quad (5-27)$$

e a conexão efetiva $\tilde{t}_{\alpha\beta} = \tilde{t}_0^2 g_{0\sigma}$ entre os PQ's α e β . Substituindo $g_{0\sigma} = \frac{1}{\omega - \epsilon_0}$ nesta expressão e considerando que o potencial de porta Vg_0 atua diretamente em ϵ_0 obtemos que essa conexão é dada por $\tilde{t}_{\alpha\beta} = \frac{\tilde{t}_0^2}{\omega - Vg_0}$, que diminui, em módulo, com o aumento do potencial de porta aplicado na base do PQ central.

Vamos supor que o sistema dos três PQ's está em equilíbrio termodinâmico com uma fonte de elétrons (os contatos) com um nível de Fermi

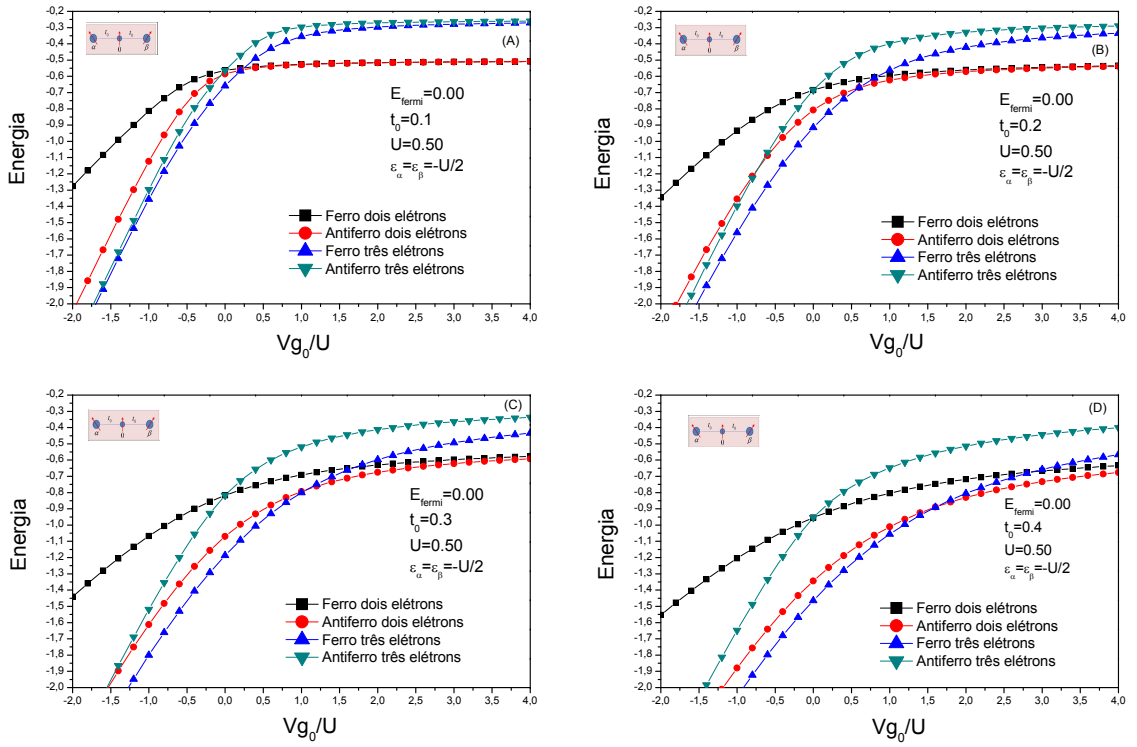


Figura 5.3: A figura mostra, para quatro diferentes valores de t_0 , as energias associadas as soluções ferro e anti-ferro que obtivemos de forma exata através da diagonalização do Hamiltoniano com duas e três partículas. Para este resultado o sistema foi preparado com o potencial de porta $Vg_{\alpha(\beta)}$ dos PQ's laterais fixado em $-U/2$, onde $U=0.5$, e as energias foram avaliadas em função do potencial Vg_0 aplicado na base do PQ central.

$E_f = 0$, mas sem interagir com ela. Neste caso podemos obter da figura 5.3 os valores de Vg_0 em que ocorre a transição entre os regimes anti-ferro de dois e ferro de três elétrons no sistema de PQ's. Esta transição é caracterizada pela interseção entre as curvas vermelha e azul em cada quadrante da figura e, como podemos observar, ocorre para valores de Vg_0 que se afastam do nível de Fermi com o aumento da conexão t_0 entre os PQ's. Esta informação se torna importante no tratamento do sistema completo da figura 5.2, pois nos permite identificar o número N de partículas nas diferentes regiões de Vg_0 e ajuda a esclarecer o comportamento da carga que entra no sistema através do PQ central. Os resultados para o sistema completo são apresentados na seção a seguir.

5.5

Resultados

5.5.1

Carga e condutância em função das conexões e do potencial aplicado ao PQ central.

Esta seção é dedicada a apresentação e discussão dos resultados que obtivemos ao estudar as propriedades eletrônicas e de transporte no sistema de PQ's da figura 5.1. Os primeiros resultados são provenientes de um estudo em função do potencial Vg_0 aplicado na base do PQ central para o sistema com diferentes magnitudes da conexão t_0 entre os PQ's e foram obtidos com $t_{L(R)} = 0.2$ e $Vg_{\alpha(\beta)} = -U/2$, sendo $U = 0.5$, conforme mencionamos na seção anterior. Nestes resultados, os parâmetros Vg_0 e t_0 são idênticos aos que utilizamos na obtenção da solução exata para o sistema desacoplado dos reservatórios. Essa solução pode, assim, ser utilizada no sentido de ajudar a entender algumas características destes resultados, como a carga eletrônica e a natureza da correlação $\langle S_\alpha S_\beta \rangle$ em diferentes regiões dos parâmetros considerados. Numa segunda etapa apresentamos os resultados que obtivemos variando o potencial de porta $Vg_{\alpha(\beta)}$ dos PQ's laterais e, por último, apresentamos resultados e discutimos a extensão da nuvem Kondo e a temperatura Kondo em função dos parâmetros do sistema que estamos considerando. Também desenvolvemos um estudo a temperatura finita onde investigamos o comportamento do parâmetro de renormalização Z com o aumento da temperatura do sistema e obtemos para diversas magnitudes da conexão t_0 o valor T_c dessa temperatura para o qual $Z \rightarrow 0$ e o sistema é desacoplado. Esse valor é identificado com a semi-largura do pico Kondo calculado nos PQ's e está associado a temperatura Kondo T_k do sistema. Os valores de T_c obtidos são utilizados para enfatizar a relação entre a temperatura Kondo T_k e a extensão ξ_i da nuvem Kondo dentro dos contatos metálicos.

Começamos por apresentar na figura 5.4 o comportamento do estado renormalizado $\tilde{\epsilon}_{\alpha(\beta)}$ dos PQ's interagentes em função de Vg_0 para quatro diferentes valores de t_0 , no caso, $t_0 = 0.1, 0.2, 0.3$ e 0.4 . Para cada um destes valores identificamos três regiões distintas de Vg_0 , que correspondem ao sistema ocupado com duas, três e quatro partículas, sendo a região de quatro partículas simétrica a de duas (ver figura 5.6). A região de três elétrons corresponde a parte central do gráfico, definida onde $\tilde{\epsilon}_{\alpha(\beta)}$ tem um comportamento aproximadamente linear para cada um dos valores de t_0 considerados. Nas regiões em torno do valor máximo e mínimo de $\tilde{\epsilon}_{\alpha(\beta)}$ ocorrem as transições quânticas que são responsáveis, respectivamente, por levar o sistema de um estado ferro de

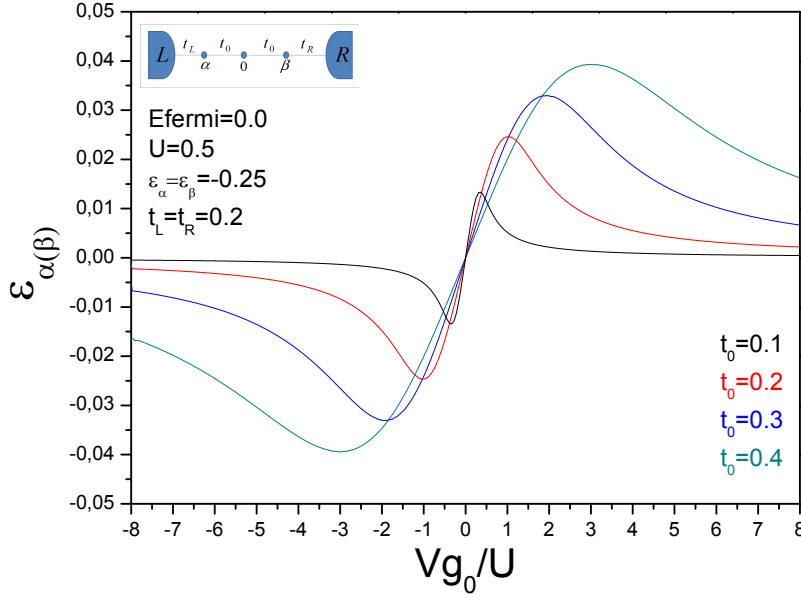


Figura 5.4: A figura mostra o comportamento do estado renormalizado $\tilde{\epsilon}_{\alpha(\beta)}$ dos PQ's interagentes em função do potencial de porta aplicado na base do PQ central para diferentes valores da conexão t_0 entre os PQ's. O sistema é considerado na posição de simetria partícula-buraco, com $\epsilon_{\alpha(\beta)} = -U/2$.

três a outro anti-ferro de dois e quatro elétrons. No caso do sistema desacoplado dos reservatórios essas transições ocorrem de forma abrupta num dado ponto do espaço dos parâmetros, inexistindo qualquer região de superposição entre os estados ferro e antiferro. Considerando as curvas que obtivemos para $\tilde{\epsilon}_{\alpha(\beta)}$ observamos para os quatro valores de t_0 que a região em que essas curvas começam a apresentar um comportamento aproximadamente linear, caracterizando o início da região ferro de três elétrons, concorda aproximadamente com a interseção entre as linhas vermelha e azul em cada um dos quadrantes da figura 5.3, que mostra a transição entre os regimes anti-ferro de dois e ferro de três elétrons para o sistema desacoplado dos reservatórios mas em equilíbrio termodinâmico com eles. A concordância entre estes valores permite concluir que o sistema completo da figura 5.1 é ferro com três elétrons e anti-ferro com dois ou quatro elétrons. De fato este resultado foi verificado diagonalizando um aglomerado de nove sítios (73).

O resultado obtido a partir do estado fundamental do aglomerado é mostrado na figura 5.5 e descreve para $t_0 = 0,1, 0,2$ e $0,3$ a correlação de spin entre as diferentes componentes do sistema de PQ's que estamos considerando. Este resultado confirma a natureza ferro e antiferro da correlação de spin $\langle S_{\alpha}S_{\beta} \rangle$ entre PQ's interagentes para o sistema com três e dois elétrons, respectivamente (ver figura 5.7), e concorda qualitativamente com o nosso resultado no que se refere a região de transição entre estes dois regimes. Considerando, por exemplo, a curva azul, obtida para $t_0 = 0,3$, observamos que

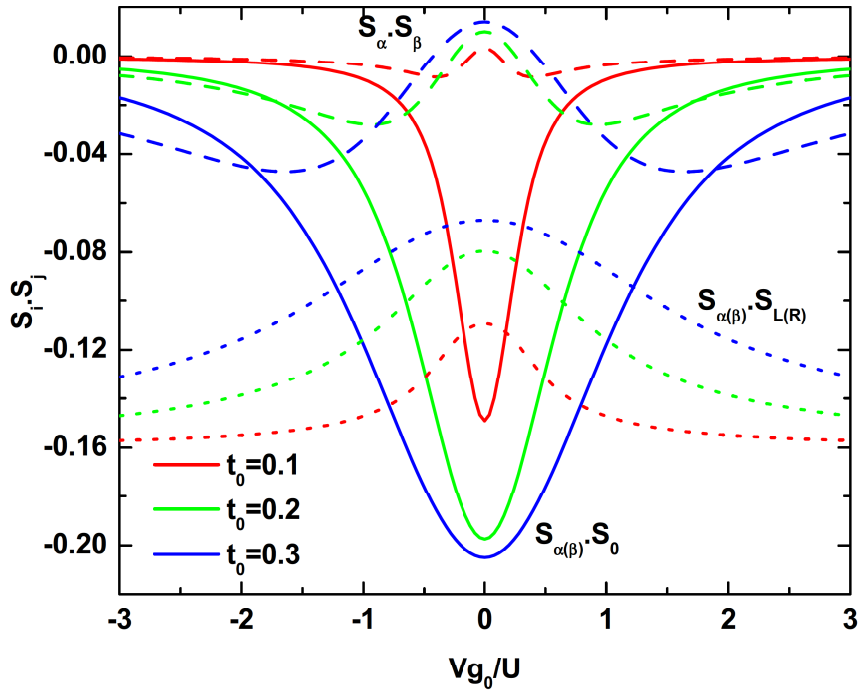


Figura 5.5: A figura mostra a correlação de spin entre as diferentes partes do sistema de três PQ's que estamos tratando neste capítulo.

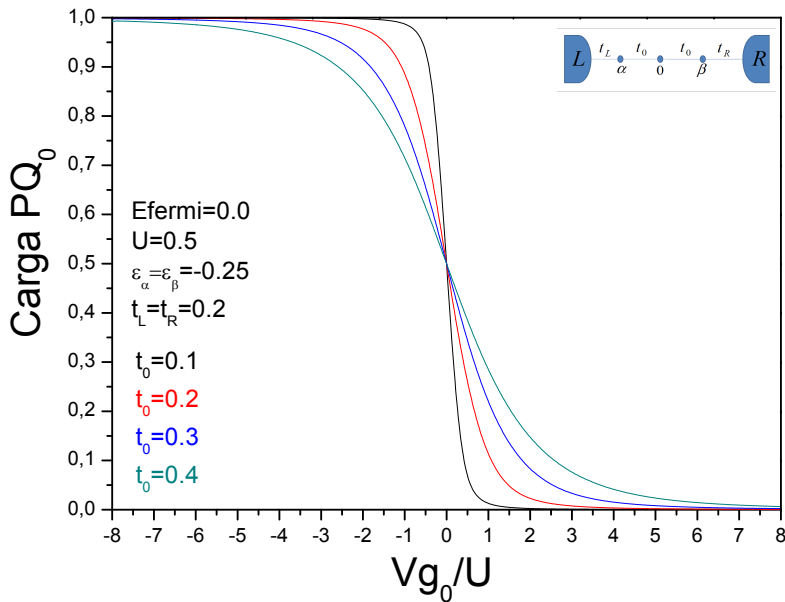


Figura 5.6: A figura mostra o estado de carga do PQ central calculado em função do potencial de porta aplicado na base desse PQ e para diferentes valores da conexão t_0 entre os PQ's. O sistema é considerado na posição de simetria partícula-buraco, com $\epsilon_{\alpha(\beta)} = -U/2$.

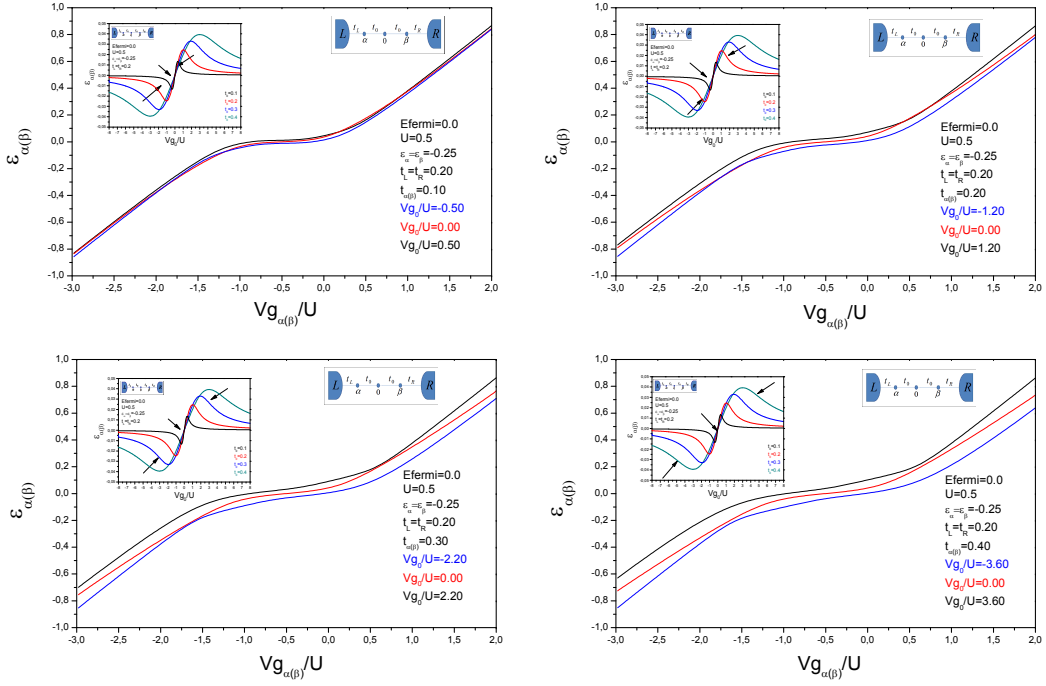


Figura 5.7: A figura mostra o comportamento do estado renormalizado $\epsilon_{\alpha(\beta)}$ em função do potencial de porta $Vg_{\alpha(\beta)}$ no PQ $\alpha(\beta)$ para o sistema com o nível de energia ϵ_0 do PQ central ajustado em três diferentes posições. Cada quadrante corresponde a um valor adotado para a conexão t_0 com esse PQ, sendo $t_0 = 0.1, 0.2, 0.3$ e 0.4 . Para esses quatro valores de t_0 o potencial de porta Vg_0 aplicado ao PQ central é ajustado dentro das regiões de dois, três e quatro elétrons. Na região de três elétrons este potencial é ajustado em $Vg_0 = 0$ e nas regiões de dois e quatro elétrons próximo a fronteira com a região de três elétrons.

em ambos os resultados a transição entre os regimes anti-ferro de dois e ferro de três elétrons ocorre para $Vg_0/U \approx 1.0$. Os resultados também concordam quando comparamos as curvas obtidas para $t_0 = 0.1$ e $t_0 = 0.2$ com os dois métodos. Ainda no resultado da figura 5.5 observamos que o aumento de t_0 e o conseqüente fortalecimento da correlação anti-ferromagnética $\langle S_{\alpha(\beta)} S_0 \rangle$ com o PQ do meio, embora diminua a correlação $\langle S_{L(R)} S_{\alpha(\beta)} \rangle$ dos PQ's com os spins dos contatos metálicos, não é suficiente para destruir o regime Kondo no sistema de PQ's, que coexiste com o estado anti-ferro na região de três elétrons. A correlação anti-ferro $\langle S_{\alpha(\beta)} S_0 \rangle$ nada mais é do que o início de um acoplamento Kondo dos PQ's com o elétron não correlacionado do centro que logo será dominante quanto mais sítios entre os PQ's sejam introduzidos num estudo da interação RKKY. Na região de dois elétrons o estado anti-ferro concorreria com o regime Kondo e tenderia a diminuir a magnitude dessa correlação, mas é rapidamente enfraquecido com a diminuição da conexão equivalente $\tilde{t}_{\alpha\beta} = t_0^2/(\omega - Vg_0)$ entre os PQ's α e β a medida que ϵ_0 se

afasta do nível de Fermi. Essa propriedade é observada no gráfico da figura 5.5 pelo comportamento das linhas tracejadas que se aproximam de zero com o aumento em módulo do potencial de porta Vg_0 aplicado na base do PQ central.

Na figura 5.6 apresentamos um resultado que mostra a carga por spin que entra no sistema através do PQ central em função do potencial de porta Vg_0 aplicado na base desse PQ para $t_0 = 0.1, 0.2, 0.3$ e 0.4 . Com $Vg_{\alpha(\beta)}$ ajustado em $-U/2$ os PQ's laterais já estão ocupados com um elétron cada e as curvas mostradas na figura descrevem a transição do estado de ocupação do sistema entre dois e quatro elétrons. Observamos nesse resultado que essa transição ocorre de forma mais abrupta para valores menores da conexão t_0 com o PQ central e que a passagem de $N = 2 \rightarrow N = 3$ e de $N = 3 \rightarrow N = 4$ elétrons concorda com os resultados que obtivemos através da solução exata e do estado renormalizado $\tilde{\epsilon}_{\alpha(\beta)}$ que apresentamos na figura 5.4 se adotarmos como critério que essas transições ocorrem, respectivamente, em 0.25 e 0.75 no eixo das ordenadas do gráfico da carga. Tomando a curva cinza como exemplo, observamos esses pontos em $Vg_0/U = 1.6$ e $Vg_0/U = -1.6$, que correspondem aos limites da região em que $\tilde{\epsilon}_{\alpha(\beta)}$ apresenta um comportamento aproximadamente linear em função de Vg_0 , no resultado da figura 5.4, e caracterizam, respectivamente, o início da região de transição para os regimes anti-ferro de dois e de quatro elétrons no sistema de PQ's.

É conveniente estudar a instalação do regime Kondo no sistema de três PQ's e investigar a possível compatibilidade deste regime com a natureza ferro e anti-ferro da correlação $\langle S_\alpha S_\beta \rangle$ nas regiões de três e dois elétrons, respectivamente. Para isso consideramos os quatro valores de t_0 utilizados no resultado da figura 5.4 e, para cada um desses valores, ajustamos o potencial de porta Vg_0 em três diferentes posições, que correspondem ao sistema ocupado com dois, três e quatro elétrons. Na região de três elétrons ajustamos este potencial em $Vg_0 = 0$ para os quatro valores de t_0 considerados enquanto que nas regiões de dois e quatro elétrons, para cada conexão t_0 , adotamos de forma arbitrária valores de Vg_0 próximos as regiões onde $\tilde{\epsilon}_{\alpha(\beta)}$ é máximo e mínimo, respectivamente. Com Vg_0 fixo calculamos o estado renormalizado $\tilde{\epsilon}_{\alpha(\beta)}$ em função do potencial de porta $Vg_{\alpha(\beta)}$ aplicado nos PQ's interagentes.

Os resultados que obtivemos são apresentados na figura 5.7 e mostram através dos platôs obtidos para $\tilde{\epsilon}_{\alpha(\beta)}$ o estabelecimento do regime Kondo independente da magnitude considerada para a conexão t_0 entre os PQ's e do número de partículas no sistema. Identificamos neste resultado a compatibilidade do regime Kondo com o estado ferro na região de três elétrons. Já nas regiões de dois e quatro elétrons observamos que, embora concorrente com este regime, a correlação antiferro entre os spins dos PQ's não é forte o suficiente

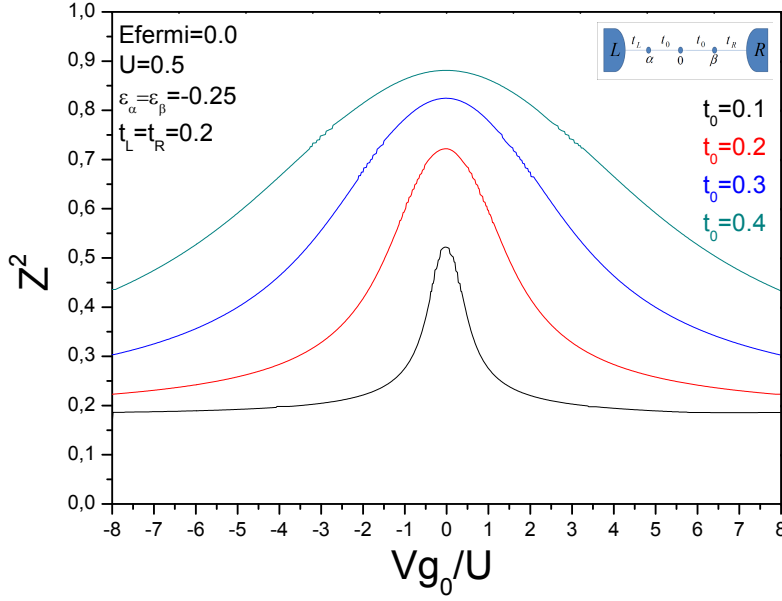


Figura 5.8: A figura mostra o comportamento do parâmetro Z^2 em função do potencial de porta Vg_0 aplicado na base do PQ central para diferentes valores da conexão t_0 entre os PQ's. O sistema é considerado na posição de simetria partícula-buraco, com $\epsilon_{\alpha(\beta)} = -U/2$.

para destruir o estado Kondo estabelecido no sistema. Esse comportamento pode ser entendido se pensarmos que a conexão equivalente $\tilde{t}_{\alpha\beta} = \tilde{t}_0^2 / (\omega - Vg_0)$, definida na seção anterior, diminui com a distância de Vg_0 em relação ao nível de Fermi $\omega = \epsilon_f$ e enfraquece o estado anti-ferro em relação ao regime Kondo resultante do acoplamento com os spins dos reservatórios. De fato podemos observar no resultado da figura 5.4 que $\tilde{\epsilon}_{\alpha(\beta)}$ se aproxima do nível de Fermi com o aumento em módulo de Vg_0 , caracterizando o fortalecimento do regime Kondo no sistema de PQ's.

A intensidade da renormalização Kondo com os spins dos contatos metálicos nas regiões de dois, três e quatro elétrons pode ser identificada no resultado da figura 5.8 onde mostramos o comportamento do parâmetro de renormalização Z^2 em função do potencial de porta Vg_0 e para os quatro valores de t_0 que estamos considerando. Este resultado mostra que a renormalização diminui com o aumento de t_0 , o que é compatível com o fato de ϵ_α ser mais dependente do Vg_α na região Kondo e com a diminuição da correlação Kondo na região de três elétrons que observamos no resultado obtido através da diagonalização do cluster, assim como seu fortalecimento com a distância entre Vg_0 e o nível de Fermi.

Na figura 5.9 mostramos a condutância do sistema em função do potencial de porta Vg_0 aplicado no PQ central e identificamos neste resultado os sinais característicos da correlação Kondo nas regiões ferro de três e anti-

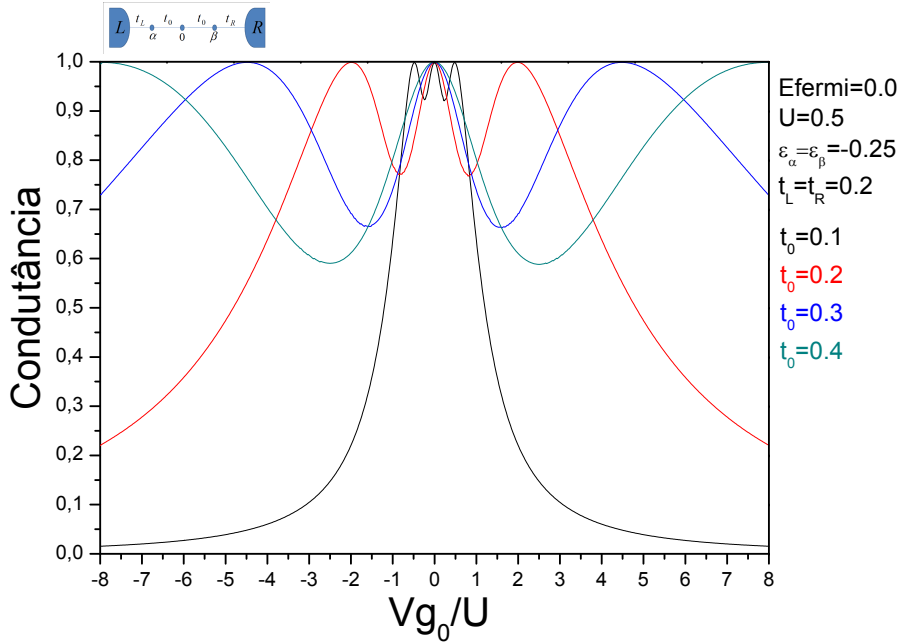


Figura 5.9: A figura mostra o comportamento da condutância em função do potencial de porta aplicado na base do PQ central para diferentes valores da conexão t_0 entre os PQ's. O sistema é considerado na posição de simetria partícula-buraco, com $\epsilon_{\alpha(\beta)} = -U/2$.

ferro de dois e quatro elétrons. Observamos neste resultado que a condutância apresenta um pico em $Vg_0 = 0$ que independe do valor de t_0 considerado e que está associado a compatibilidade do regime Kondo com a correlação ferromagnética na região de três elétrons. Em torno desse pico observamos duas regiões de Vg_0 que aumentam com a magnitude da conexão t_0 entre os PQ's e onde condutância apresenta valores mais baixos. A diminuição da condutância nessas regiões reflete a mudança no número de partículas do sistema de três para dois (ou quatro) elétrons e a consequente transição para o estado anti-ferro, que concorre com o regime Kondo e diminui a intensidade da condutância. Já o aumento dessas regiões com t_0 está associado ao fortalecimento da conexão equivalente $\tilde{t}_{\alpha\beta}$ e da correlação anti-ferro entre os PQ's interagentes. Aumentando o valor de Vg_0 e, como consequência, da distância entre ϵ_0 e o nível de Fermi, $\tilde{t}_{\alpha\beta}$ se aproxima de zero e fortalece o regime Kondo instalado no sistema. Como resultado a condutância volta a subir, atingindo seu valor máximo em $G = 1.0$.

No formalismo dos bósons escravos o regime Kondo se manifesta através da renormalização das conexões t_i entre seus diferentes componentes e do nível $\epsilon_{\alpha(\beta)}$ do estado local nos PQ's interagentes. A renormalização das conexões se dá por meio do parâmetro Z e a do nível $\epsilon_{\alpha(\beta)}$ através do multiplicador de Lagrange $\lambda_{2\sigma}^{\alpha(\beta)}$, sendo $\tilde{t}_i = Zt_i$ e $\tilde{\epsilon}_{\alpha(\beta)} = \epsilon_{\alpha(\beta)} + \lambda_{2\sigma}^{\alpha(\beta)}$. Considerando o efeito sobre as conexões definimos $1 - Z^2$ como um parâmetro que ajuda a caracterizar o regime Kondo no sistema de PQ's. Quando o valor desse

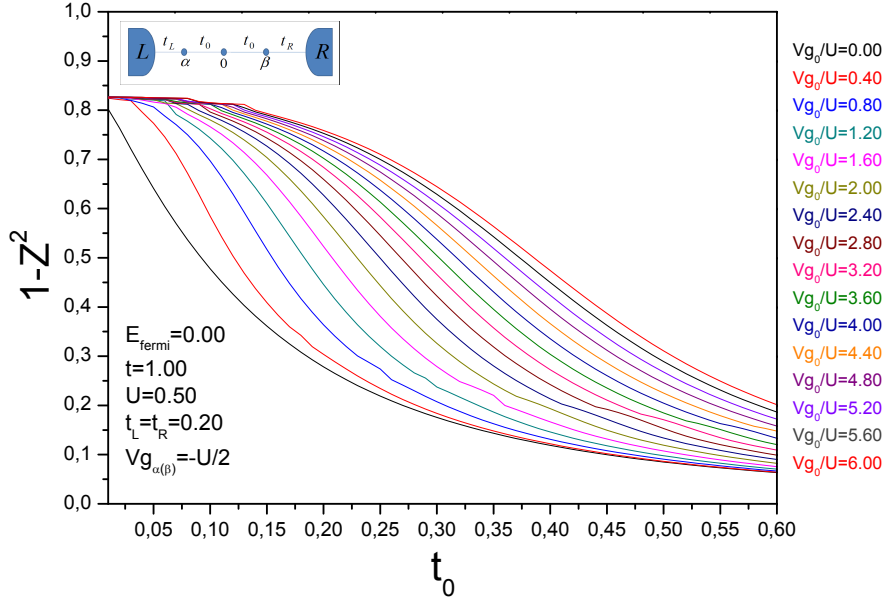


Figura 5.10: A figura mostra o comportamento do parâmetro $1 - Z^2$ em função da conexão t_0 para diferentes posições do nível local ϵ_0 do PQ central. Para este resultado os níveis de energia dos PQ's laterais são colocados em $\epsilon_{\alpha(\beta)} = -U/2$.

parâmetro se aproxima de zero é porque temos $Z \approx 1$ e praticamente nenhuma renormalização para as conexões t_i . Por outro lado o aumento no valor de $1 - Z^2$ reflete a diminuição de Z e o aumento da renormalização de suas conexões. Com relação ao nível renormalizado identificamos a presença do regime Kondo quando $\tilde{\epsilon}_{\alpha(\beta)} \approx 0$ para toda a região Kondo de valores de $Vg_{\alpha(\beta)}$, e a ausência desse regime quando esse nível se aproxima de seu valor original $\epsilon_{\alpha(\beta)}$. No nosso estudo ajustamos $\epsilon_{\alpha(\beta)}$ em $-U/2$ através do potencial de porta $Vg_{\alpha(\beta)}$ aplicado na base dos PQ's interagentes.

Nos resultados das figuras 5.10 e 5.11 mostramos, respectivamente, o comportamento do parâmetro $1 - Z^2$ e do estado renormalizado $\tilde{\epsilon}_{\alpha(\beta)}$ em função da magnitude da conexão t_0 e para diferentes posições do nível local ϵ_0 , descritas pelos valores adotados para o potencial de porta Vg_0 aplicado na base do PQ central. Para estes resultados ajustamos em $Vg_{\alpha(\beta)} = -U/2$ o potencial de porta nos PQ's interagentes e investigamos as propriedades do sistema com a entrada de um terceiro elétron através do PQ do meio. A informação contida nesses gráficos nos permite mapear a intensidade do regime Kondo nas diferentes regiões de Vg_0 e t_0 e serve como complemento para o resultado que apresentamos na figura 5.4. Considerando este resultado na análise de $1 - Z^2$ e $\tilde{\epsilon}_{\alpha(\beta)}$ observamos que o aumento no valor da conexão t_0 aumenta a carga do sitio 0 (figura 5.6) para o mesmo valor de Vg_0 e é responsável por levar o sistema de um estado predominantemente anti-ferro de dois (ou quatro) a um estado predominantemente ferro de três elétrons. Essa transição é identificada

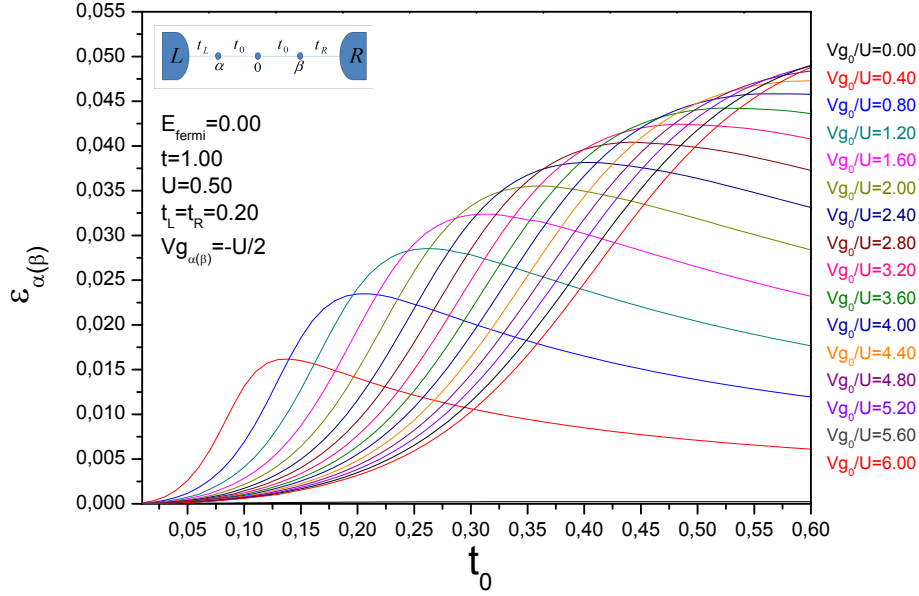


Figura 5.11: A figura mostra o comportamento dos níveis renormalizados $\tilde{\epsilon}_{\alpha(\beta)}$ dos PQ's laterais em função da conexão t_0 para diferentes posições do nível local ϵ_0 do PQ central. Para este resultado os níveis de energia dos PQ's laterais são colocados em $\epsilon_{\alpha(\beta)} = -U/2$.

pelo ponto a partir do qual os gráficos de $1 - Z^2$ e $\tilde{\epsilon}_{\alpha(\beta)}$ passam a ter uma curvatura aproximadamente constante. No caso de $\tilde{\epsilon}_{\alpha(\beta)}$ esse ponto é observado logo a direita da parte mais encurvada do gráfico, onde essa grandeza atinge seu valor máximo. Como exemplo consideramos a linha cinza, obtida para $Vg_0/U = 1.20$, nos gráficos de $1 - Z^2$ e $\tilde{\epsilon}_{\alpha(\beta)}$. Observamos que a transição para o estado ferro de três elétrons ocorre aproximadamente em $t_0 = 0.3$, o que está de acordo com o resultado da figura 5.4 se considerarmos que a curva azul, obtida para $\tilde{\epsilon}_{\alpha(\beta)}$ com $t_0 = 0.3$, passa a ter um comportamento quase que linear com Vg_0 a partir de $Vg_0 \approx 1.2$.

Com relação a intensidade do regime Kondo nas regiões de dois (ou quatro) e três elétrons observamos a partir dos resultados que o aumento da interação anti-ferro com a conexão t_0 na região de dois elétrons é responsável por enfraquecer o regime Kondo instalado no sistema. Essa competição é caracterizada pela rápida diminuição na magnitude do parâmetro $1 - Z^2$ e pela tendência do estado renormalizado de se afastar de $\tilde{\epsilon}_{\alpha(\beta)} = 0$ na região de dois elétrons. Observamos que após entrar numa região de transição, caracterizada por uma curvatura mais acentuada nos gráficos de $1 - Z^2$ e $\tilde{\epsilon}_{\alpha(\beta)}$, o sistema passa a região de três elétrons, onde observamos que o fortalecimento do estado ferro com o aumento de t_0 não se reflete diretamente na diminuição da correlação Kondo e que, portanto, esses regimes coexistem nessa região. Observamos ainda que o sistema consegue se manter no regime Kondo para

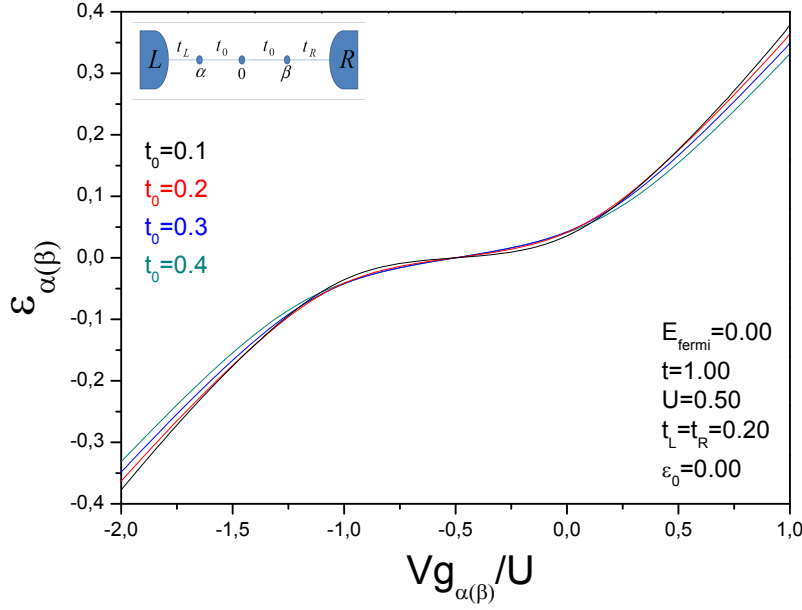


Figura 5.12: A figura mostra o comportamento do estado renormalizado $\tilde{\epsilon}_{\alpha(\beta)}$ dos PQ's interagentes em função do potencial de porta aplicado na base destes PQ's e para diferentes valores da conexão t_0 . O nível de energia do PQ central é colocado em zero e, como podemos observar, o sistema apresenta simetria partícula buraco em torno de $\epsilon_{\alpha(\beta)} = -U/2$. O resultado é praticamente independente do valor de t_0 .

valores maiores de t_0 se ϵ_0 for ajustado em valores mais afastados do nível de Fermi. Esse comportamento pode ser explicado em termos da conexão efetiva entre $\tilde{t}_{\alpha\beta}$ entre os PQ's α e β , que diminui com o aumento, em módulo, do potencial Vg_0 aplicado na base do PQ central.

5.5.2

Carga e condutância em função das conexões e do potencial aplicado aos PQ's laterais

Os resultados que discutiremos em seguida são provenientes de um estudo dedicado especificamente ao processo de coexistência entre a correlação ferromagnética e o regime Kondo na região de três elétrons. Nesse estudo consideramos $t_{L(R)} = 0.2$ para a magnitude das conexões com os contatos metálicos, $U = 0.5$ nos PQ's interagentes e ajustamos em $\epsilon_0 = 0$ o nível local do PQ central através do potencial de porta Vg_0 aplicado na base desse PQ. Com esses valores fixos investigamos a natureza dos regimes quânticos instalados no sistema em função do potencial de porta $Vg_{\alpha(\beta)}$ aplicado na base dos PQ's interagentes e para diferentes magnitudes da conexão t_0 com o PQ central. As características particulares a esses regimes são observadas nas curvas que obtivemos para o estado renormalizado $\tilde{\epsilon}_{\alpha(\beta)}$, para o parâmetro de renormalização Z^2 e para a condutância através do sistema. Para melhor

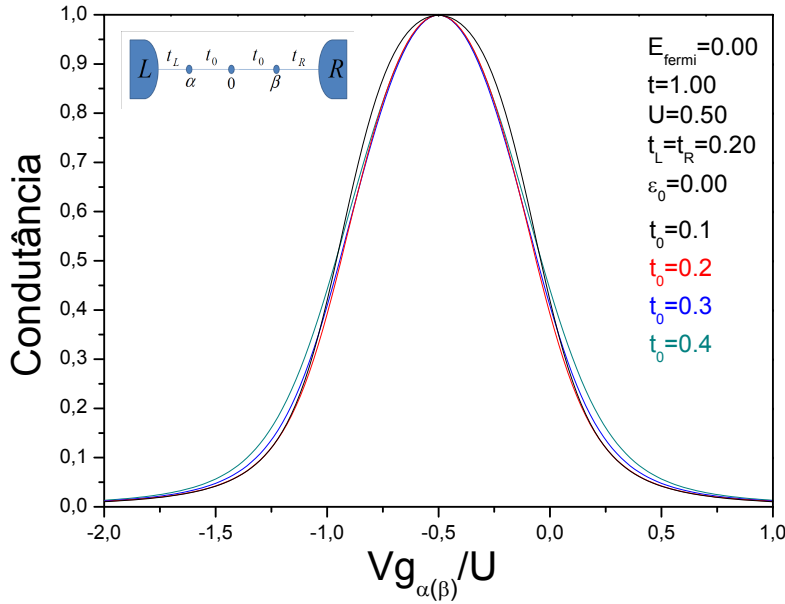


Figura 5.13: A figura mostra a condutância em função do potencial de porta aplicado na base dos PQ's interagentes $\alpha(\beta)$ e para diferentes valores da conexão t_0 . O nível de energia do PQ central é colocado em zero e, como podemos observar, o sistema apresenta simetria partícula buraco em torno de $\epsilon_{\alpha(\beta)} = -U/2$.

entender estes resultados calculamos a DOS nos PQ's interagentes para o sistema na posição de simetria partícula-buraco e para diferentes magnitudes da conexão t_0 entre os PQ's. Os resultados mostram claramente a coexistência do regime Kondo com o estado ferro na região de três elétrons.

No resultado da figura 5.12, construído a partir de dados já apresentados na figura 5.7, observamos que a estrutura de platô característica do regime Kondo no sistema de três PQ's é preservada com o aumento na magnitude da conexão t_0 entre os PQ's e que, portanto, esse regime permanece instalado no sistema e coexiste com o estado ferro na região de três elétrons. Com a presença do regime Kondo a condutância do sistema assume um valor relativamente alto entre $-U < Vg_{\alpha(\beta)} < 0$ e que praticamente independe da magnitude de t_0 . Esse comportamento pode ser observado no resultado da figura 5.13 e está associado à existência de um pico Kondo na região do nível de Fermi como mostramos na figura 5.14. Este resultado foi obtido com o sistema na posição de simetria partícula buraco e mostra três picos característicos do estado molecular ferro no sistema de três PQ's. Observamos nesse resultado que o aumento da conexão t_0 é responsável por modificar a posição dos picos laterais e, em menor intensidade, a largura destes e do pico central que permanece fixo no nível de Fermi de modo a permitir o transporte de elétrons através do sistema.

No resultado da figura 5.14 apresentamos a DOS calculada nos PQ's

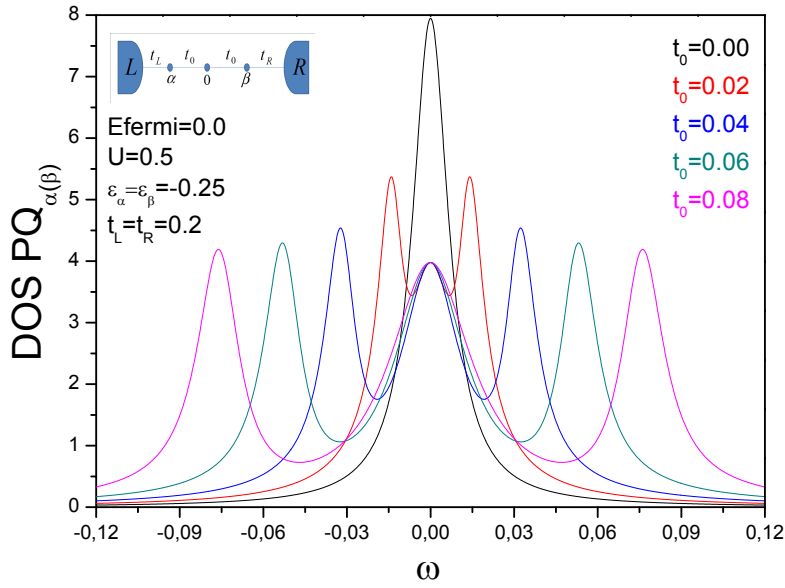


Figura 5.14: A figura mostra o comportamento da DOS local nos PQ's interagentes α e β com o aumento na magnitude da conexão t_0 com o PQ central 0. Para este resultado os níveis de energia dos PQ's laterais são colocados em $\epsilon_{\alpha(\beta)} = -U/2$.

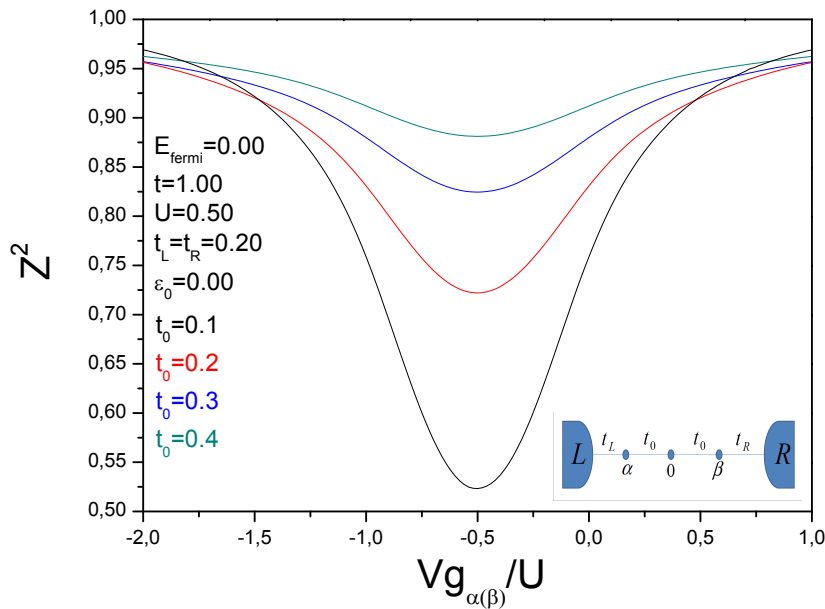


Figura 5.15: A figura mostra o comportamento do parâmetro Z^2 em função do potencial de porta aplicado na base dos PQ's interagentes $\alpha(\beta)$ e para diferentes valores da conexão t_0 . O nível de energia do PQ central é colocado em zero e, como podemos observar, o sistema apresenta simetria partícula buraco em torno de $\epsilon_{\alpha(\beta)} = -U/2$.

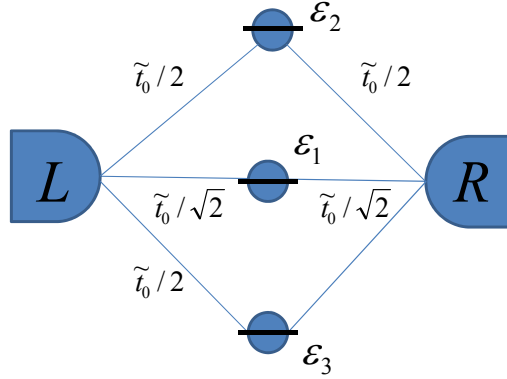


Figura 5.16: A figura mostra os níveis de energia associados aos estados Φ_1 , Φ_2 e Φ_3 que constituem a base que renormaliza o sistema de três PQ's.

interagentes na região em torno do nível de Fermi e mostramos a formação do estado molecular ferro na região de três elétrons ($Vg_{\alpha(\beta)} = -U/2$) com o aumento gradativo da conexão t_0 entre os PQ's. A curva preta deste gráfico representa o pico Kondo proveniente do acoplamento anti-ferro entre o spin dos PQ's e os spins dos elétrons em cada um dos reservatórios. Com o aumento na magnitude de t_0 a DOS dos PQ's laterais se transforma gradativamente numa estrutura de três picos com larguras que se modificam como consequência da renormalização introduzida pelo parâmetro Z . Um pico central que permanece fixo no nível de Fermi e mais dois laterais que são simétricos e cujas posições estão diretamente relacionadas ao valor da conexão t_0 entre os PQ's.

Esta estrutura da densidade de estados pode ser melhor entendida representando o Hamiltoniano do sistema numa base que diagonalize o sistema dos três sítios α , 0 e β ($\epsilon_\alpha = \epsilon_\beta$). Chamando φ_α , φ_0 e φ_β estas funções de onda e lembrando que o Hamiltoniano equivalente na aproximação de campo médio dos bósons escravos é de um corpo a nossa estrutura pode ser representada na base,

$$\Phi_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}(\varphi_\alpha - \varphi_\beta) \quad (5-28)$$

$$\Phi_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\frac{1}{\sqrt{2}}(\varphi_\alpha + \varphi_\beta) + \varphi_0\right] \quad (5-29)$$

$$\Phi_3 = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\frac{1}{\sqrt{2}}(\varphi_\alpha + \varphi_\beta) - \varphi_0\right] \quad (5-30)$$

como aparece na figura 5.16, sendo $\epsilon_1 = \epsilon_\alpha$, $\epsilon_2 = \epsilon_\alpha + \sqrt{2}\tilde{t}_0$ e $\epsilon_3 = \epsilon_\alpha - \sqrt{2}\tilde{t}_0$. Como no regime Kondo $\epsilon_\alpha = \epsilon_\beta = 0$ o sitio 1 atua como um PQ de energia zero e conexão $\tilde{t}_\alpha/\sqrt{2}$, independente de t_0 e é o responsável por gerar uma densidade de estados como a projetada no sitio α (figura 5.14) com um pico Kondo centrado em zero. Os outros dois sitios 2 e 3 são responsáveis pelos picos satélites na densidade de estados em $\sqrt{2}\tilde{t}_0$ e $-\sqrt{2}\tilde{t}_0$ cujas posições são naturalmente fortemente dependentes de t_0 através de \tilde{t}_0 . Elas levam a informação do regime Kondo e podem ser interpretadas conceitualmente como um "splitting" da ressonância Kondo de duas impurezas que interagem via um terceiro sitio sem interação eletrônica. Isto é o caráter conceitual do problema. Naturalmente que o valor do desdobramento dos picos e o pico Kondo central depende dos valores dos parâmetros. Em particular esta discussão é quantitativamente válida para uma situação de simetria elétron-buraco.

A persistência do pico central na posição do nível de Fermi pode ser entendida se pensarmos que o elétron do PQ central é um elétron de condução ($U = 0$). Desta forma observamos que os elétrons do PQ's α e β se acoplam Kondo com o PQ do meio e identificamos a origem do pico central que permanece fixo no nível de Fermi, mesmo para valores altos da conexão t_0 entre os PQ's. A existência desse segundo acoplamento Kondo vai ser identificada nos resultados apresentados mais a seguir e que descrevem a estrutura da nuvem Kondo dentro dos contatos metálicos. Ao discutir as propriedades dessa nuvem identificamos a semi-largura dos picos laterais com o inverso de sua extensão e a posição dos picos laterais com a temperatura T_c que desacopla o sistema. Já discutimos no capítulo anterior que, no formalismo dos bósons escravos, T_c está relacionada a temperatura Kondo do sistema.

Para investigar a intensidade do regime Kondo na região de três elétrons apresentamos na figura 5.15 um resultado para o parâmetro de renormalização Z^2 em função do potencial de porta $Vg_{\alpha\beta}$ aplicado aos PQ's interagentes. Este resultado mostra que as conexões do sistema são mais renormalizadas na região de três elétrons, em torno de $Vg_{\alpha(\beta)} = -U/2$ no regime Kondo, e que esta renormalização diminui a medida que nos afastamos desta região e também com o aumento da conexão t_0 entre os PQ's. Como discutimos previamente esse comportamento é observado diretamente pela diferença $1 - Z^2$ em todas as regiões de $Vg_{\alpha\beta}$.

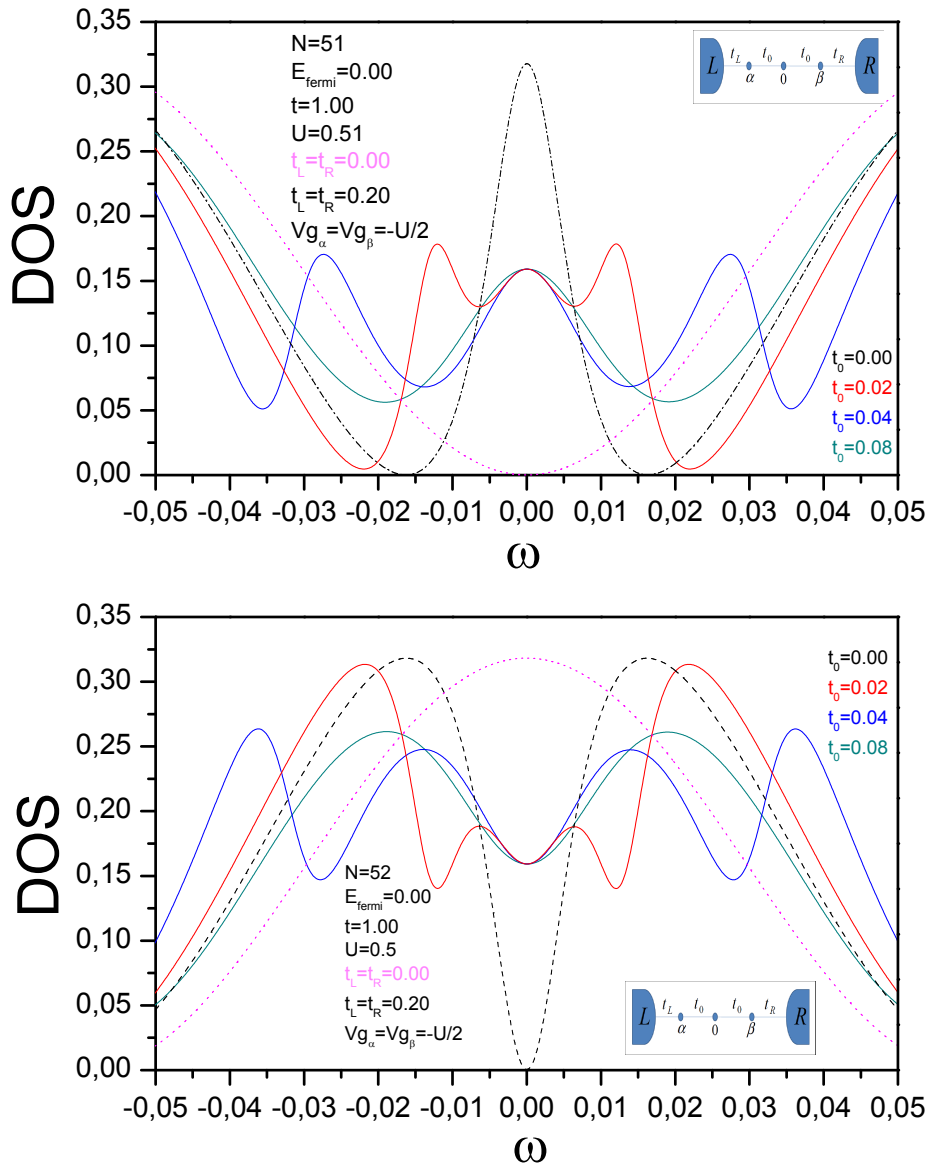


Figura 5.17: A figura mostra o efeito provocado na DOS dos sítios $N = 51$ e $N = 52$ dentro dos reservatórios pelo processo de formação do estado ferromagnético com o aumento na magnitude da conexão t_0 entre os PQ's. Os dois gráficos mostram a ressonância e a anti-ressonância observada na DOS próxima ao nível de Fermi quando N é ímpar ou par, respectivamente. Em ambos os gráficos a curva preta tracejada representa a DOS para o sistema com $t_0 = 0$ e a curva rosa pontilhada a DOS considerando os reservatórios isolados ($t_{L(R)} = 0$). Já as curvas vermelha, azul e cinza são obtidas para $t_0 = 0.02$, $t_0 = 0.04$ e $t_0 = 0.08$, respectivamente. O sistema foi considerado na posição de simetria partícula-buraco, com $\epsilon_{\alpha(\beta)} = -U/2$ nos PQ's interagentes e $\epsilon_0 = 0$ no PQ central.

5.5.3

A Nuvem e a temperatura Kondo

Dedicamos esta parte da seção a discussão dos resultados que obtivemos ao estudar as propriedades da nuvem Kondo no interior dos contatos metálicos. Para este estudo ajustamos em $t_{L(R)} = 0.2$ a conexão com os reservatórios e consideramos o sistema na posição de simetria partícula-buraco, com $\epsilon_0 = 0$ e $Vg_{\alpha(\beta)} = -U/2$. Com esses parâmetros definidos investigamos a forma de como o efeito Kondo refletido na DOS do PQ $\alpha(\beta)$ com um pico no nível de Fermi se propaga até um determinado sítio N no interior dos contatos metálicos e qual é a influencia do parâmetro t_0 . Mais especificamente estudamos a extensão ξ_i da nuvem Kondo dentro dos contatos $L(R)$ em função da magnitude da conexão t_0 com o PQ do meio e o conseqüente fortalecimento do estado ferro.

Na figura 5.17 apresentamos os resultados que obtivemos para a DOS calculada nos sítios $N = 51$ e $N = 52$ dentro dos contatos metálicos. Além da alternância entre ressonância e anti-ressonância na DOS no nível de Fermi para N ímpar e par, respectivamente, este resultado mostra claramente o efeito nestes sítios provocado pela presença das ressonâncias Kondo do PQ $\alpha(\beta)$. Dentre as curvas que aparecem neste gráfico a preta tracejada foi obtida para $t_0 = 0.0$ e incorpora nos sítios $N = 51$ e $N = 52$ a presença do pico Kondo observado na DOS da impureza. Já a curva rosa pontilhada corresponde aos reservatórios isolados e, portanto, não possui nenhuma informação associada ao regime Kondo. Observamos nos gráficos que o aumento no valor da conexão t_0 não elimina na DOS a ressonância (ou anti-ressonância) no nível de Fermi que caracteriza a presença do estado Kondo no sistema. Neste caso a presença de três ressonâncias ou anti-ressonâncias dependendo do sítio ser par ou ímpar aparecem na região vizinha ao nível de Fermi. O fortalecimento do estado ferro com o aumento de t_0 não destrói a existência de uma nuvem Kondo dentro dos contatos metálicos.

Da mesma forma que nos sistemas de um e dois PQ's consideramos as propriedades associadas a extensão da nuvem Kondo como incorporadas na função $F(N)$, que definimos na expressão 4.15 do capítulo anterior. A informação física correspondente ao sistema de três PQ's é incorporada à $F(N)$ através da função de Green local $G_{\alpha\alpha(\beta\beta)}^\sigma$ calculada nos PQ's interagentes. A conexão com o PQ central incorporada através desta função faz com que $F(N)$ apresente um comportamento oscilatório, que é envolto por uma exponencial. A extensão ξ_i da nuvem Kondo é obtida calculando o inverso da inclinação da reta que assintoticamente é tangente a $\ln(F(N))$. Na figura 5.18 mostramos as retas tangentes a $\ln(F(N))$ para diferentes valores da conexão t_0 entre os PQ's. Observamos neste resultado que a inclinação das retas aumenta com a conexão

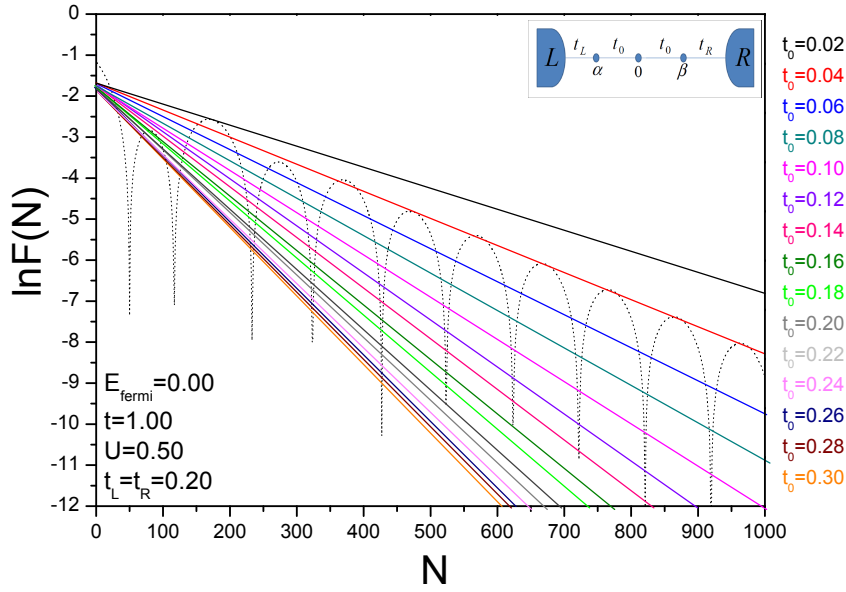


Figura 5.18: A figura mostra as retas tangentes as curvas de $\ln F(N)$ no limite assintótico para diferentes valores da conexão t_0 com o PQ central. Este resultado foi obtido para o sistema na posição de simetria partícula-buraco, com $\epsilon_{\alpha(\beta)} = -U/2$ nos PQ's laterais e $\epsilon_0 = 0$ no PQ central.

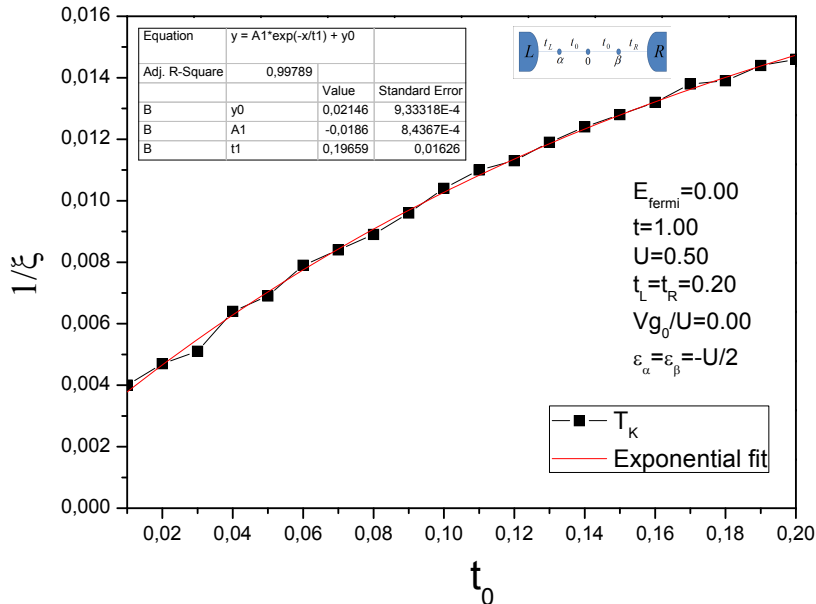


Figura 5.19: A figura mostra o inverso da extensão ξ_i da nuvem Kondo em função da conexão t_0 entre os PQ's. Este resultado foi obtido para o sistema na posição de simetria partícula-buraco, com $\epsilon_{\alpha(\beta)} = -U/2$ nos PQ's laterais e $\epsilon_0 = 0$ no PQ central.

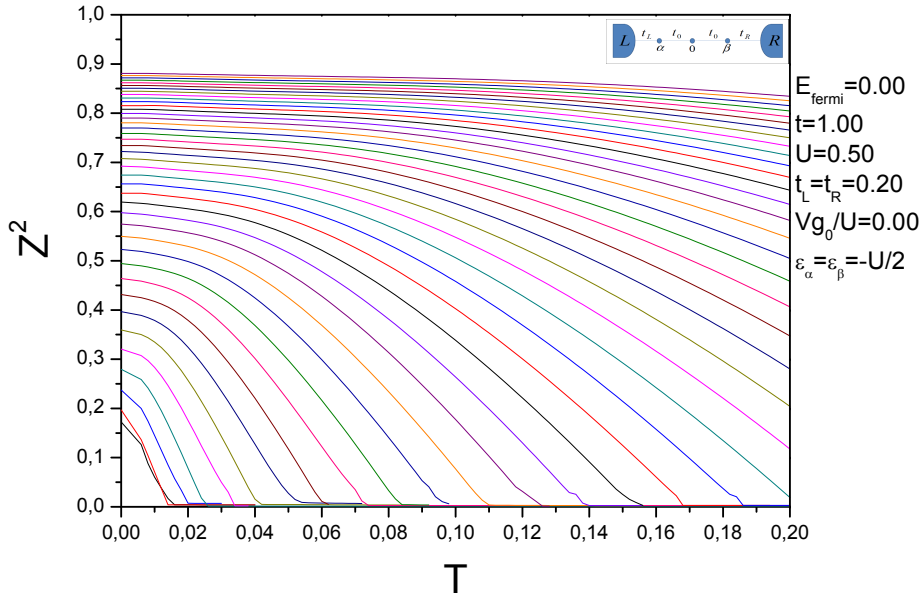


Figura 5.20: A figura mostra o comportamento do parâmetro Z^2 em função da temperatura T para $t_0 = 0.01; 0.02; 0.03; \dots; 0.30$ entre os PQ's. Este resultado foi obtido para o sistema na posição de simetria partícula buraco, com $\epsilon_{\alpha(\beta)} = -U/2$ nos PQ's laterais e $\epsilon_0 = 0$ no PQ central.

t_0 com o sítio do meio e tende a se estabilizar para valores relativamente grandes dessa conexão ($t_0 \geq 0.25$). Esse comportamento caracteriza uma redução da extensão da nuvem Kondo dentro dos contatos com o aumento de t_0 até um limite mínimo ξ_0 , que permanece invariante independente do valor de t_0 . Na figura 5.19 mostramos a inclinação das retas, que representa $1/\xi_i$, em função de t_0 e observamos que a extensão da nuvem Kondo obedece uma expressão do tipo $\xi(t_0) = A + Be^{-\alpha t_0}$, onde A , B e α são constantes. É importante destacar que, diferente do capítulo anterior, não poderemos fazer uma associação direta entre a temperatura Kondo definida pela temperatura de corte T_c que propõe a teoria de campo médio dos bósons escravos e a extensão da nuvem Kondo dentro dos reservatórios. Pensamos que isto se deve ao acoplamento Kondo com o elétron de condução do sítio do meio que também contribui para o efeito Kondo e, como consequência, para definir a temperatura Kondo T_k . Assim, para obter esta energia característica julgamos ser necessária uma melhor compreensão do efeito desse segundo acoplamento Kondo nas propriedades do sistema. Esse trabalho não será apresentado nesta tese mas deixamos indicado que o estudo da nuvem Kondo dentro de uma cadeia de N sítios entre os PQ's pode esclarecer o papel desempenhado pelo sítio de condução intermediário no limite de $N=1$. Lembremos que a extensão da nuvem Kondo apresentada está refletida à propagação do efeito Kondo nos contatos, embora exista um sítio entre os PQ's contribuindo para o regime Kondo que está fora deles.

Para documentar esta incongruência calculamos o que seria a temperatura Kondo do sistema estudando o valor de T para o qual $Z = 0$. Sabemos da propriedade associada ao método dos bósons escravos de desacoplar os PQ's do resto do sistema quando sua temperatura T atinge o valor T_c , como discutido nos capítulos anteriores. No contexto do formalismo este desacoplamento é causado pelo parâmetro Z que tende a zero quando $T \approx T_K$. Este comportamento é observado no resultado da figura 5.20 onde mostramos o comportamento de Z^2 em função da temperatura para diferentes magnitudes da conexão t_0 entre os PQ's. Observamos que para qualquer valor de t_0 o desacoplamento do sistema não ocorre de forma tão abrupta. Os valores de T_c obtidos a partir do gráfico de Z^2 em função de t_0 na figura 5.20 são apresentados no resultado da figura 5.21 e mostram um comportamento parabólico em função da conexão t_0 entre os PQ's, semelhante ao que é obtido para a energia $T^* = 2t_0^2/\Delta\epsilon$ que caracteriza a transição singleto-triplete no estado fundamental de uma molécula com dois elétrons num sistema descrito por um estado f caracterizado por uma repulsão Coulombiana conectado a um estado de condução, sendo $\Delta\epsilon$ a separação entre a energia destes estados (72). Lembremos que o estado singleto é neste caso o estado Kondo. Seria lógico imaginar assim que no sistema em estudo a temperatura Kondo tenha uma dependência parabólica com t_0 sobretudo quando T_K produzida pelos contatos seja, para valores crescentes de t_0 , menor que a T_K definida pelos PQ's com o seu sítio de condução intermediário. Como conclusão percebemos que a dependência da temperatura Kondo com t_0 definida a partir da extensão da nuvem Kondo é incompatível com a obtida pela temperatura de corte do formalismo de campo médio dos bósons escravos.

5.6 Conclusões

Apresentamos neste capítulo um estudo das propriedades eletrônicas e de transporte num sistema de três PQ's com dois PQ's interagentes conectados indiretamente através de um terceiro não interagente. Investigamos a natureza dos regimes quânticos instalados neste sistema e obtivemos a presença do regime Kondo nas diferentes regiões que exploramos no espaço dos parâmetros t_0 e Vg_0 . Observamos a presença dos estados ferro e anti-ferro no sistema com três e dois (ou quatro) elétrons, respectivamente. Mostramos a tendência da correlação anti-ferro de competir com o regime Kondo na região de dois e quatro elétrons, compatível com o resultado obtido no capítulo anterior. Ao mesmo tempo, na região de três elétrons, mostramos compatibilidade deste regime com o estado ferro, independentemente do valor de t_0 entre os PQ's

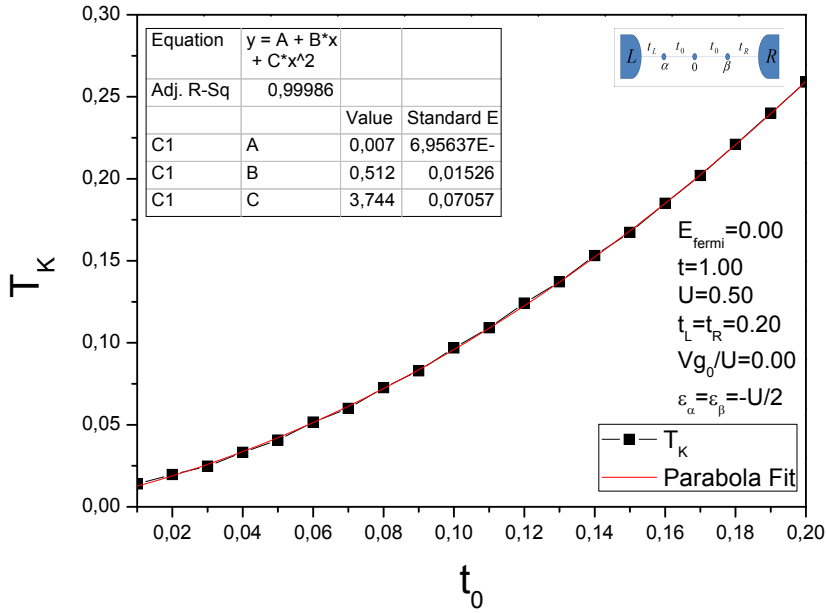


Figura 5.21: A figura mostra a temperatura Kondo T_k do sistema em função da conexão t_0 entre os PQ's. Este resultado foi obtido para o sistema na posição de simetria partícula-buraco, com $\tilde{\epsilon}_{\alpha(\beta)} = -U/2$ nos PQ's laterais e $\epsilon_0 = 0$ no PQ central.

e investigamos o reflexo do processo de coexistência entre estes dois regimes na estrutura da nuvem Kondo dentro dos reservatórios. Estudamos a nuvem Kondo dentro dos contatos e mostramos que esta não é destruída independente do valor da conexão t_0 entre os PQ's, apresentando um comportamento do tipo $\xi(t_0) = A + Be^{-\alpha t_0}$, onde A , B e α são constantes. Terminamos o capítulo desenvolvendo um estudo da temperatura de corte T_c do sistema em função da magnitude da conexão t_0 com o sítio central. Para isso utilizamos a propriedade do método dos bósons escravos que desacopla o sistema quando sua temperatura atinge um valor $T = T_c$, da ordem da temperatura Kondo T_k do sistema. Mostramos que T_k apresenta um comportamento parabólico em função da conexão t_0 entre os PQ's, compatível com o resultado obtido no capítulo anterior.

6

Efeito Kondo e correlação eletrônica num sistema de três PQ's interagentes

6.1

Introdução

Este capítulo é dedicado ao estudo das propriedades físicas e de transporte numa estrutura de três PQ's com um PQ central conectado a dois contatos metálicos. Como materialização para esse sistema encontramos na natureza a molécula de Polyoxometalate (27), proposta como um dispositivo capaz de operar como uma porta lógica quântica baseada num arranjo experimental envolvendo uma ponta de STM conectada na região central da molécula que funciona no regime de valência mista como um reservatório eletrônico. A função de onda dos elétrons não localizados podem se superpor a dos elétrons

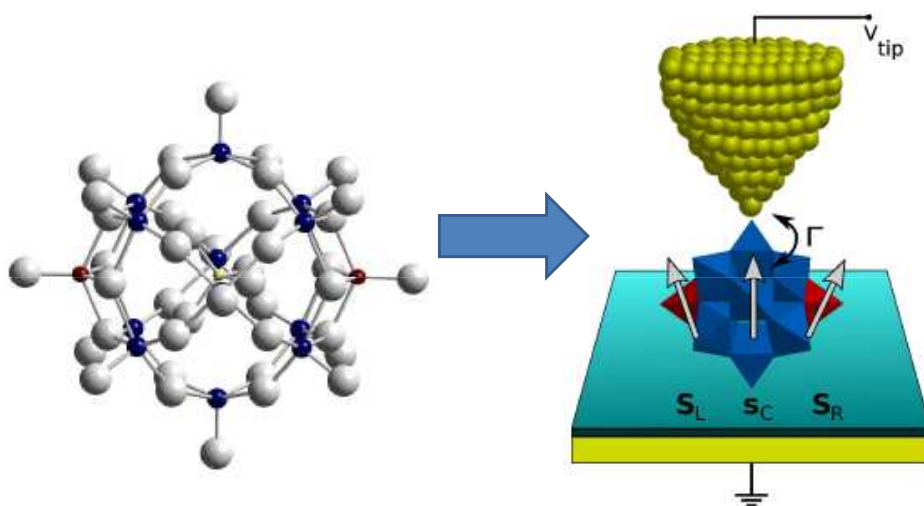


Figura 6.1: A figura mostra em (A) a molécula real polyoxometalate proposta por D.Loss e em (B) uma representação dessa molécula conectada a dois reservatórios de elétrons através do PQ central. Nessa estrutura estudamos a correlação entre os spins S_L e S_R em função da ocupação do PQ central, cujo spin total é representamos por S_C .

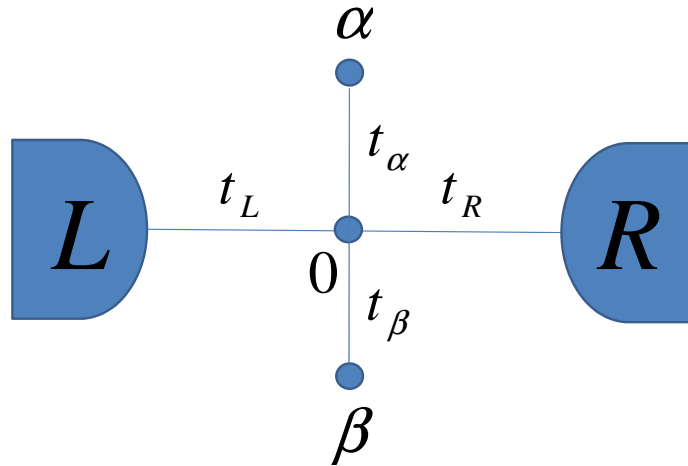


Figura 6.2: A figura mostra uma molécula artificial composta por três PQ's interagentes. O PQ 0 se conecta aos eletrodos L e R, bem como aos demais PQ's, α e β , formando a estrutura de PQ's apresentada.

que existem nas regiões laterais da molécula e dos elétrons ligados a sua parte central. Os spins eletrônicos nessas regiões se enxergam magneticamente de forma indireta por intermédio dos elétrons da parte central, sendo o sinal dessa correlação dependente do estado de carga nessa parte da molécula. Que este sistema possa funcionar como uma porta quântica (24, 25) está baseado na possibilidade de se controlar o estado de carga na parte central da molécula pela aplicação de um potencial externo através de um eletrodo metálico, e com isso manipular o sinal da correlação entre os spins dos elétrons situados nos átomos que compõem a parte externa da molécula (29). A possibilidade de se controlar a correlação magnética e, em consequência, a orientação relativa entre os spins faz dessa molécula ou, em geral, de uma estrutura de três PQ's (23), uma potencial candidata a funcionar como uma porta quântica, dispositivo capaz de armazenar e processar a informação quântica contida nos spins externos e que interagem ferro ou antiferromagneticamente entre eles.

A vantagem em se utilizar um sistema de PQ's assim como apresentamos na figura 6.2 está na versatilidade desse tipo de estrutura no que diz respeito a possibilidade de controle das propriedades dos PQ's a partir de eletrodos metálicos. De fato, através destes contatos podemos aplicar potenciais de porta V_i (com $i = \alpha, 0, \beta$) e com isso regular o estado de carga nos PQ's e a magnitude de suas conexões com o resto do sistema. Em nossa proposta o potencial de porta é ajustado de forma a deixar os PQ's laterais ocupados com apenas um elétron. Dependendo da magnitude das conexões do PQ central com os reservatórios $t_{L(R)}$ e com os PQ's laterais $t_{\alpha(\beta)}$, bem como do estado de ocupação deste PQ, podemos encontrar o sistema em diferentes regimes. No

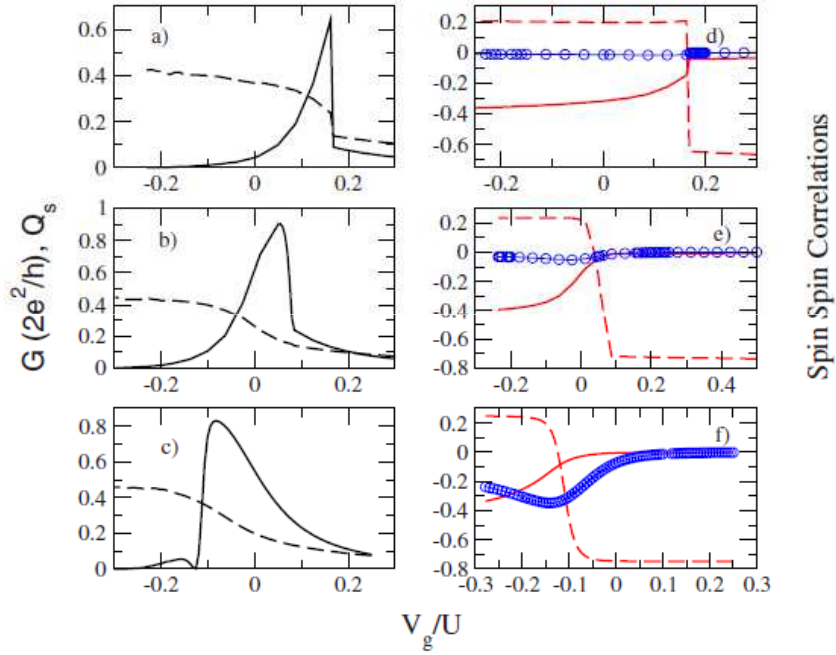


Figura 6.3: Os resultados apresentados a esquerda da figura mostram a condutância (linha contínua) e a carga no PQ central (linha tracejada). No lado direito os gráficos mostram as correlações de spin entre as diferentes partes do sistema, sendo $S_\alpha S_\beta$ representado pela linha tracejada, $S_L S_0$ pelas linhas circulares e $S_{\alpha(\beta)} S_0$ pela linha contínua. Os resultados (a) e (b) correspondem a $t_{\alpha(\beta)} = 0.4$, (b) e (e) a $t_{\alpha(\beta)} = 0.2$ e (c) e (f) a $t_{\alpha(\beta)} = 0.05$. $J = 0$, $U = 2$ e $t_{L(R)} = 0.3$.

caso, observamos a coexistência de um regime Kondo de dois estágios (17, 18) e uma correlação ferro entre os spins dos PQ's externos para pequenos valores de $t_{\alpha(\beta)}$. De acordo com o que vimos no primeiro capítulo o regime Kondo de dois estágios resulta do acoplamento dos spins laterais com o spin do PQ central que a sua vez se acopla Kondo com os spins dos reservatórios de elétrons. Este regime está caracterizado por duas temperaturas, T_{K1} e T_{K2} , com $T_{K2} < T_{K1}$. Os resultados mostram que aumentando o valor das conexões com os PQ's laterais, esse efeito é destruído e o sistema passa a um estado molecular com correlação ferro entre os elétrons dos PQ's externos.

No que diz respeito a temperatura T estudamos sua influência sobre as propriedades de transporte para diferentes valores dos parâmetros que definem a estrutura. Os resultados mostram que o aumento de $T > T_{K2}$ resulta na destruição do efeito Kondo de dois estágios, com recomposição do pico Kondo no PQ central na região próxima ao nível de Fermi já que para $T < T_{K2}$ o pico

Kondo apresenta uma anti-ressonância no nível de Fermi (17). A recomposição da DOS nessa região abre um canal de condução que se reflete no aumento da condutância entre os reservatórios. Quanto aos bósons escravos, analisamos o comportamento com a temperatura dos parâmetros Z_0 e ZZ_0 introduzidos pelo método e que renormalizam as conexões do PQ central com os reservatórios e com os PQ's laterais, respectivamente. Os resultados mostram que, do ponto de vista do formalismo, e para pequenos valores das conexões laterais $t_{\alpha(\beta)}$, o efeito provocado pelo aumento da temperatura consiste basicamente no estreitamento do pico Kondo e no eventual desacoplamento dos PQ's α e β . Vimos também que as propriedades do sistema são insensíveis com a temperatura quando as conexões $t_{\alpha(\beta)}$ são relativamente grandes e o sistema se encontra no regime molecular.

6.2

Efeito Kondo e o conceito de porta lógica

Esta seção é dedicada a compreensão dos detalhes referentes ao transporte de elétrons através do sistema de PQ's que estamos propondo e, principalmente, de que forma essa estrutura pode ser utilizada como uma porta lógica quântica (24), dispositivo que serve como uma das motivações para este trabalho. Na computação em geral, uma porta lógica, como o próprio nome indica, funciona como um dispositivo onde são realizadas operações lógicas sobre o que chamamos bits de entrada. No caso, esses bits de entrada correspondem aos valores 0 e 1 associados a passagem ou não de corrente elétrica através de um transistor e correspondem a menor unidade de informação que pode ser armazenada. Uma das propostas da computação quântica consiste em utilizar como bits de entrada os estados $|0\rangle$ e $|1\rangle$ correspondentes as projeções de spin "up" e "down" em estruturas de PQ's e realizar operações sobre esses "bits quânticos" (qbits) através de um dispositivo que acopla no tempo, ferro ou antiferromagneticamente, de forma controlada, os spins. Isto cria a possibilidade de se operar sobre estados quânticos emaranhados $|e\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$ mudando o seu grau de emaranhamento de acordo com um algoritmo que estabelece determinadas operações lógicas fixadas pelo objetivo numérico proposto. Este processo permite um enorme ganho no que se refere a velocidade de processamento de um computador quântico quando comparado com seu equivalente clássico.

No trabalho que estamos desenvolvendo levantamos a possibilidade de se utilizar a estrutura de PQ's mostrada na figura 6.2 como um dispositivo

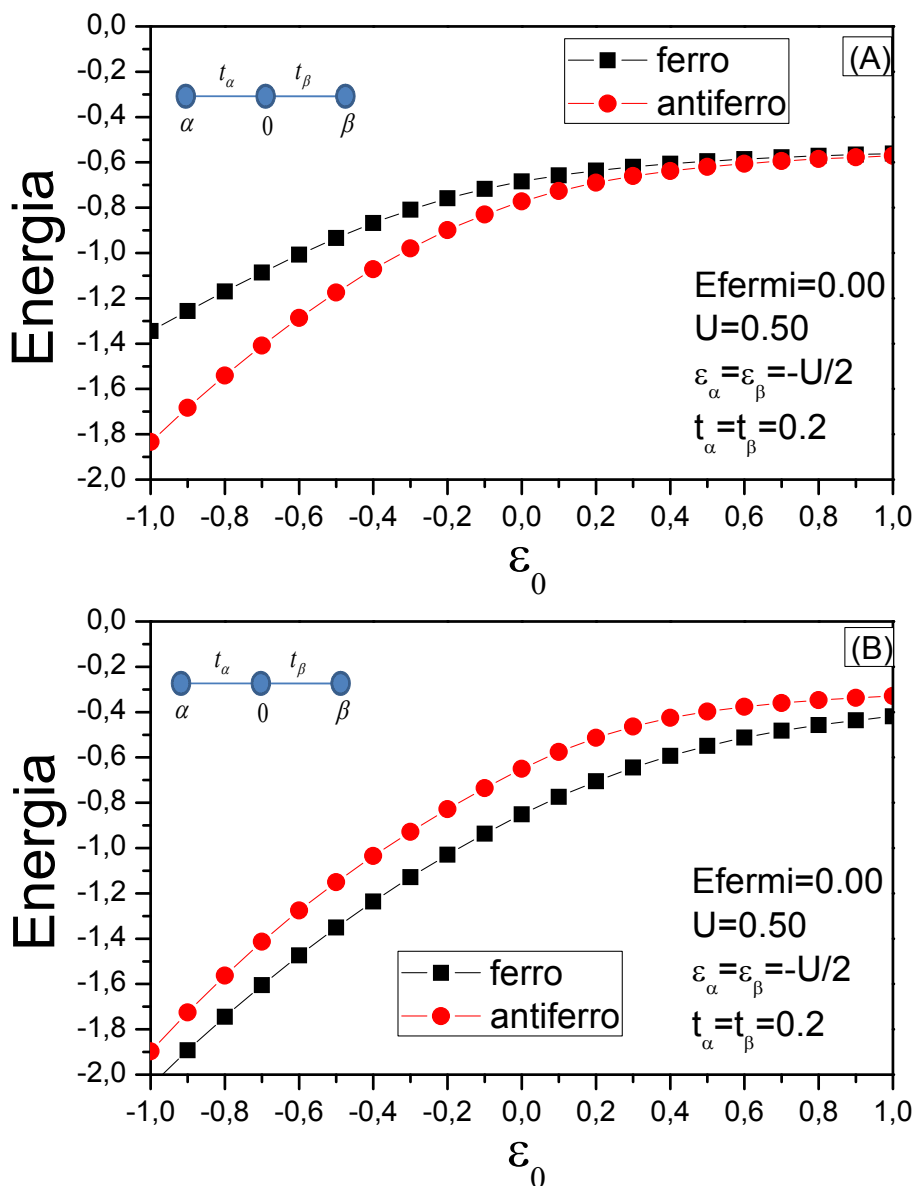


Figura 6.4: A figura mostra as soluções ferro e antiferro para o sistema de três PQ's isolados. Em (A) o sistema é ocupado com dois elétrons e em (B) com três. Observamos que no primeiro caso a solução dominante é antiferro enquanto que no segundo a solução é ferro. De acordo com o resultado da figura 3 essa propriedade é mantida quando o sistema é conectado aos reservatórios.

que pode funcionar como uma porta quântica de duas entradas. Em nosso modelo os qbits de entrada correspondem as projeções "up" e "down" dos spins dos PQ's α e β . Estes spins podem se acoplar magneticamente formando um estado emaranhado ferro ou anti-ferro, sendo $S_L \cong 1$ e $S_L \cong 0$, respectivamente operando com o potencial de porta que atua sobre ele. Este acoplamento pode ser manipulado mudando o estado de carga do PQ central. No caso, com o PQ central ocupado, a correlação entre os spins laterais é ferro favorecendo energeticamente o estado com $S_L \cong 1$. Caso contrário, com o PQ central sem carga, a correlação entre estes é anti-ferro e o estado fundamental possui $S_L \cong 0$. De fato, considerando os três PQ's isolados, o Hamiltoniano que descreve o sistema pode ser representado numa base de número de elétrons $N = 2$ de m estados e de $N = 3$ de m' estados. Os conjuntos de m e m' estados constituem uma base para um espaço de funções de dois e três elétrons, respectivamente.

Escolhendo uma base de funções adequadas é possível definir subespaços invariantes que conservam a projeção de spin repartindo as matrizes que representam o Hamiltoniano de dois e três elétrons em blocos de $S_T = 1$ e $S_T = 0$, onde S_T é um bom número quântico e representa o spin total do sistema de três PQ's. Assim, para o sistema com dois elétrons escrevemos uma base

$$\varphi_1^F = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow, 0, \downarrow\rangle + |\downarrow, 0, \uparrow\rangle) \quad (6-1)$$

$$\varphi_2^F = \frac{1}{2}(|0, \uparrow, \downarrow\rangle + |\uparrow, \downarrow, 0\rangle + |0, \downarrow, \uparrow\rangle + |\downarrow, \uparrow, 0\rangle), \quad (6-2)$$

que define um subespaço de spin total $S_T = 1$. O estado de mais baixa energia desse subespaço corresponde a uma interação ferro entre os spins dos PQ's laterais uma vez que o estado φ_1^F , que descreve uma correlação desse tipo, é bastante favorecido do ponto de vista estatístico quando comparado aos outros estados da base. No caso, o índice F que aparece nas funções se referem ao tipo de correlação representada pelo estado de mais baixa energia do subespaço, e não ao tipo de correlação representada por cada uma das funções que constituem a base. A energia desse estado pode ser obtida numericamente a partir do Hamiltoniano,

$$H_{(2e)}^F = \begin{pmatrix} \epsilon_\alpha + \epsilon_\beta & \sqrt{2}t_\alpha \\ \sqrt{2}t_\alpha & \epsilon_0 + \epsilon_\alpha/2 + \epsilon_\beta/2 \end{pmatrix},$$

representado na base que acabamos de definir. Ainda para o sistema com dois

elétrons podemos escrever uma outra base

$$\varphi_1^{AF} = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow, 0, \downarrow\rangle - |\downarrow, 0, \uparrow\rangle) \quad (6-3)$$

$$\varphi_2^{AF} = \frac{1}{2}[|0, \uparrow, \downarrow\rangle + |\uparrow, \downarrow, 0\rangle - |0, \downarrow, \uparrow\rangle - |\downarrow, \uparrow, 0\rangle] \quad (6-4)$$

$$\varphi_3^{AF} = \frac{1}{2}|0, \uparrow\downarrow, 0\rangle \quad (6-5)$$

$$\varphi_4^{AF} = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0, 0, \uparrow\downarrow\rangle - |\uparrow\downarrow, 0, 0\rangle), \quad (6-6)$$

que define um subespaço de spin total $S_T = 0$. A exemplo do que acontece no subespaço de $S_T = 1$, o estado φ_1^{AF} , que descreve uma correlação anti-ferro entre os spins laterais, é bastante favorecido quando comparado aos outros estados que constituem a base. Isso contribui para que o estado de mais baixa energia contido nesse subespaço descreva uma interação anti-ferro entre os spins dos PQ's externos. A energia desse estado é obtida a partir do Hamiltoniano

$$H_{(2e)}^{AF} = \begin{pmatrix} \epsilon_\alpha + \epsilon_\beta & \sqrt{2}t_\alpha & 0 & 0 \\ \sqrt{2}t_\alpha & \epsilon_0 + \epsilon_\alpha/2 + \epsilon_\beta/2 & 2t_\alpha & \sqrt{2}t_\alpha \\ 0 & 2t_\alpha & 2\epsilon_0 + U & 0 \\ 0 & \sqrt{2}t_\alpha & 0 & 2\epsilon_\alpha + U \end{pmatrix},$$

escrito na base que define o subespaço de $S_T = 0$. Na parte (A) da figura 6.4 apresentamos as curvas dos estados de menor energia que correspondem aos subespaços $S_T = 0$ e $S_T = 1$ de dois elétrons em função do potencial de porta aplicado na base do PQ central. Esse resultado mostra que, para o sistema com dois elétrons, o estado fundamental do sistema corresponde a uma configuração de $S_L \cong 0$, sendo S_L o spin total entre os dois PQ's laterais (que não é um bom número quântico). Como consequência, os spin externos possuem correlação anti-ferro entre eles.

Passando a considerar o sistema com três elétrons, escrevemos uma base

$$\varphi_1^F = \frac{1}{\sqrt{6}}(2|\uparrow, \downarrow, \uparrow\rangle - |\uparrow, \uparrow, \downarrow\rangle - |\downarrow, \uparrow, \uparrow\rangle) \quad (6-7)$$

$$\varphi_2^F = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0, \uparrow\downarrow, \uparrow\rangle - |\uparrow, \uparrow\downarrow, 0\rangle) \quad (6-8)$$

$$\varphi_3^F = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow, 0, \uparrow\downarrow\rangle - |\uparrow\downarrow, 0, \uparrow\rangle) \quad (6-9)$$

$$\varphi_4^F = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0, \uparrow, \uparrow\downarrow\rangle - |\uparrow\downarrow, \uparrow, 0\rangle), \quad (6-10)$$

que define um subespaço invariante de spin total $S_T = 1/2$. O estado de menor

energia pertencente a este subespaço corresponde a uma interação ferro entre os spins laterais e pode ser obtido a partir do Hamiltoniano

$$H_{(3e)}^F = \begin{pmatrix} \epsilon_\alpha + \epsilon_\beta + \epsilon_0 & \sqrt{3}t_\alpha & -\sqrt{3}t_\alpha & 0 \\ \sqrt{3}t_\alpha & 2\epsilon_0 + \epsilon_\alpha/2 + \epsilon_\beta/2 & 0 & -t_\alpha \\ -\sqrt{3}t_\alpha & 0 & 3\epsilon_\alpha/2 + 3\epsilon_\beta/2 + U & t_\alpha \\ 0 & -t_\alpha & t_\alpha & \epsilon_\alpha + \epsilon_\beta + \epsilon_0 + U \end{pmatrix},$$

representado nessa base. Consideramos ainda outra base invariante de H,

$$\varphi_1^{AF} = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow, \uparrow, \downarrow\rangle - |\downarrow, \uparrow, \uparrow\rangle) \quad (6-11)$$

$$\varphi_2^{AF} = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow, 0, \uparrow\rangle + |\uparrow, \downarrow, 0\rangle) \quad (6-12)$$

$$\varphi_3^{AF} = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow, \uparrow, 0\rangle + |0, \uparrow, \uparrow\rangle) \quad (6-13)$$

$$\varphi_4^{AF} = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0, \uparrow, \uparrow\rangle + |\uparrow, \uparrow, 0\rangle), \quad (6-14)$$

também de spin total $S_T = 1/2$ para o sistema de três elétrons. Como resultado do peso atribuído a φ_1^{AF} , o estado de menor energia pertencente a esse subespaço corresponde a uma correlação anti-ferro entre os PQ's laterais. Nessa base de estados, o Hamiltoniano de três elétrons fica escrito como

$$H_{(3e)}^{AF} = \begin{pmatrix} \epsilon_0 & t_\alpha & t_\alpha & 0 \\ t_\alpha & U & 0 & t_\alpha \\ t_\alpha & 0 & 2\epsilon_0 & t_\alpha \\ 0 & t_\alpha & -t_\alpha & \epsilon_0 + U \end{pmatrix}.$$

Diagonalizando os Hamiltonianos $H_{(3e)}^F$ e $H_{(3e)}^{AF}$ obtemos as energias dos estados de natureza ferro e anti-ferro associadas aos estados de mais baixa energia dos dois subespaços de $S_T = 1/2$. Na parte (B) da figura 6.4 apresentamos esse resultado em função do potencial de porta aplicado ao PQ central e concluímos que a configuração de mais baixa energia e que corresponde ao estado fundamental do sistema é ferro. Assim, de acordo com o que havíamos dito, concluímos que os spins dos PQ's laterais possuem correlação tipo ferro quando um elétron ocupar o PQ central e tipo anti-ferro quando este PQ se encontrar num estado de ocupação zero. O resultado apresentado na figura 6.3 (23), obtido usando uma diagonalização exata de um aglomerado, mostra que essa propriedade é preservada quando os três PQ's são conectados aos reservatórios de elétrons através do PQ central. Nesta figura as curvas tracejadas de cor preta nos quadros a esquerda e de cor vermelha

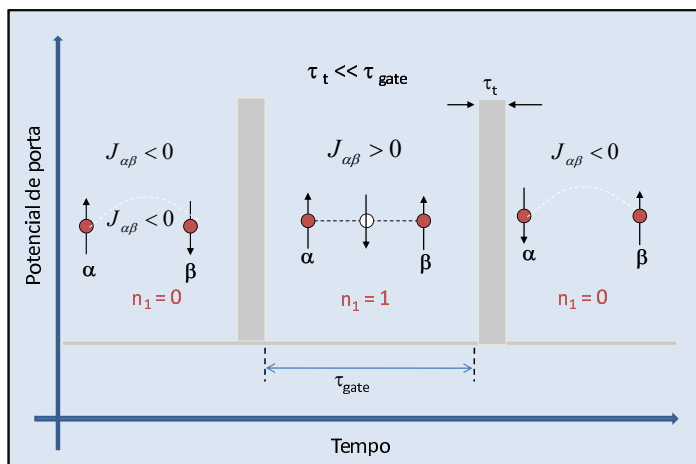


Figura 6.5: A figura apresenta um esquema mostrando as escalas de tempo envolvidas no processo de operação no modelo de porta quântica que estamos propondo.

nos quadros a direita representam, respectivamente, a carga que entra no PQ central em função do potencial de porta Vg_0 aplicado na base deste PQ e a correlação $S_\alpha S_\beta$ entre os spins dos PQ's laterais em função desse mesmo potencial. De fato, observamos nestes resultados que a transição do sistema de um estado anti-ferro a outro ferro acompanha a entrada de um terceiro elétron no sistema através do PQ central.

6.2.1

Funcionamento da porta lógica

Para ter um entendimento completo de como o sistema de três PQ's que estamos apresentando pode funcionar como uma porta quântica seria necessário um estudo dependente do tempo, uma vez que essa porta opera através da manipulação no tempo do estado de carga do PQ central e das consequentes permutações entre os estados ferro e antiferro formados pelos spins dos PQ's externos. No entanto, um estudo das propriedades estacionárias desse sistema já se apresenta bastante esclarecedor se pensarmos que os processos físicos que ocorrem no dispositivo são controlados por diferentes escalas de tempo, como ilustrado na figura 6.5. Nessa figura apresentamos um esquema onde são mostrados os processos físicos que ocorrem durante a operação desta porta lógica quântica e, também, os tempos associados a cada um desses processos. Mais especificamente, a figura mostra uma escala

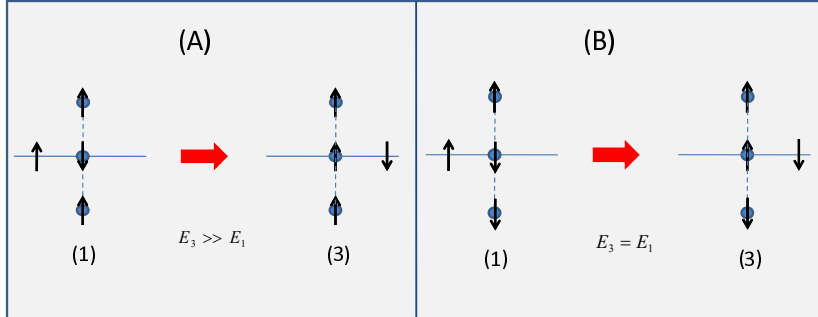


Figura 6.6: A figura mostra em (a) a incompatibilidade do efeito Kondo com a interação ferro e em (b) a compatibilidade desse efeito com a interação anti-ferro.

de tempo associada a transição do estado de carga do PQ central de 0 para 1 elétron, ou vice versa, e outra correspondente ao tempo de evolução dos spins nos PQ's laterais, como consequência do acoplamento com o spin do PQ central quando este está carregado. A primeira escala, que chamamos de tempo de tunelamento, depende da posição do potencial de porta aplicado ao PQ central Vg_0 , e da conexão $t_{L(R)}$ desse PQ com o reservatório $R(L)$, sendo dada por $\tau_t \sim \frac{\hbar|Vg_0|}{t_{L(R)}^2}$. Já a segunda escala de tempo envolvida é conhecida como tempo da porta e depende da magnitude da interação Coulombiana U no PQ central e das conexões laterais $t_{\alpha(\beta)}$, podendo ser escrita como $\tau_g \sim \frac{\hbar U}{t_{\alpha(\beta)}^2}$, que corresponde ao tempo do processo durante o qual os spins externos interagem no interior da estrutura para que o sistema funcione como uma porta lógica (23, 24). Lembremos que a interação magnética entre os spins é da ordem de t_{α}^2/U .

No que se refere as escalas de tempo envolvidas na operação da porta quântica, para que esta funcione de forma adequada, é necessário que $\tau_g \gg \tau_t$, sendo quase que instantânea a transição entre os estados de carga do PQ central em comparação com o tempo de evolução dos spins laterais resultante de seu acoplamento com esse PQ. Por outro lado, o processo de leitura da informação quântica, baseada numa medida de transporte fora do regime Kondo deveria poder diferenciar uma configuração ferro de outra anti-ferro para o qual seria necessário pequenos valores de $t_{L(R)}$ e, como consequência, valores de τ_t bem maiores que os exigidos para a operação adequada da porta quântica. De fato, na proposta de porta quântica apresentada na referência (27) a leitura do spin total referente aos PQ's externos é realizada a partir da condutância

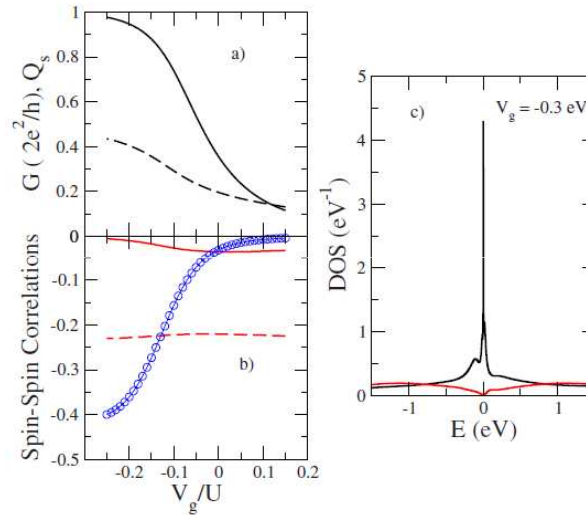


Figura 6.7: A figura mostra em (a) a condutância (linha contínua) e a carga no PQ central (linha tracejada), em (b) a correlações de spin $S_\alpha S_0$ (linha contínua), $S_L S_0$ (linha com círculos) e $S_u^z S_L^z$ (linha tracejadas), e em (c) a DOS local no PQ central (linha de cor preta) e nos PQ's laterais (linha de cor vermelha). Estes resultados correspondem a $t_{\alpha(\beta)} = 0.4$, $J = 0.4$, $U = 2$ e $t_{L(R)} = 0.3$.

medida através do PQ central com o sistema num regime de acoplamento fraco (cotunneling regime). Como uma alternativa a esse problema é proposto a mudança no tempo das conexões $t_{L(R)}$ variando-se a distância entre a ponta de STM e a molécula de forma controlada, o que é bastante desafiador do ponto de vista experimental. Segundo essa proposta o valor da conexão com os reservatórios seria aumentado durante as transições do estado de carga do PQ central, que passa de zero para um e de um para zero elétron, e é drasticamente diminuída no momento de fazer a leitura da informação, para que esta se torne possível. No entanto é conhecido que os tempos envolvidos na mudança de posição da ponta é da ordem de milissegundos, muito maior que os tempos envolvidos na dinâmica de funcionamento da porta quântica, o que faz de fato o funcionamento da porta quântica inviável.

Para evitar estas dificuldades estamos propondo que a condutância seja medida estando o sistema num regime molecular, com $t_{L(R)} \sim t_{\alpha(\beta)}$ e para valores de $Vg_{\alpha(\beta)}$ entre 0 e U , com $Vg_{\alpha(\beta)}$ negativo. Esses parâmetros asseguram o bom funcionamento da porta, como já havíamos dito, pois sendo $t_{L(R)}$ grande os tempos de tunelamento são pequenos. Por outro lado, estando $T < T_K$, a diferença entre as condutâncias obtidas para as configurações ferro e anti-ferro

devido ao efeito Kondo permitiria distinguir entre essas duas configurações sem mudar o valor de $t_{L(R)}$. O processo de leitura seria possível precisamente porque sendo $t_{L(R)}$ grande, o efeito Kondo desempenha um papel fundamental. Pode ser mostrado que esse efeito está diretamente associado a um resultado para a condutância que depende da configuração entre os spins dos PQ's laterais. Mais especificamente a informação referente ao alinhamento ferro ou anti-ferro dos PQ's externos se reflete no estabelecimento ou não do efeito Kondo no sistema(23). No caso de um alinhamento ferro entre os spins laterais, com o sistema no regime molecular, o efeito Kondo não aparece e a condutância medida é praticamente zero. Por outro lado o efeito Kondo é compatível com um alinhamento anti-ferro entre spins laterais e a condutância do sistema seria alta permitindo assim através de um estudo do transporte eletrônico fazer uma distinção clara entre uma configuração ferro e outra anti-ferro. No caso da configuração anti-ferro a presença de um elétron no PQ central durante o processo de medida da corrente tende a modificar a orientação anti-ferro existente quando o PQ se encontrava vazio. O regime Kondo, entretanto, vai demorar um tempo τ_K para ser destruído, sendo este tempo da ordem de um décimo da inversa da temperatura Kondo T_K (30). Para que o dispositivo possa funcionar este tempo deve ser maior que o processo de medida da condutância como para permitir que o regime Kondo tenha uma influência clara sobre ela. Isto pode ser conseguido manipulando os parâmetros do sistema. Este é um fenômeno fora do equilíbrio. Para entender qual é o efeito da correlação anti-ferro sobre a condutância pode ser feito um cálculo dessa grandeza em equilíbrio acrescentando uma interação de troca J muito pequena entre os spins de α e β , que atua no sentido de estabilizar a configuração anti-ferro entre esses spins. Este cálculo não será feito aqui, mas os resultados obtidos com o método LDECA(23) e mostrados nas figuras 6.3 e 6.7 comprovam nosso raciocínio. De fato analisando as curvas contínua de cor preta e tracejada de cor vermelha obtidas, respectivamente, para a condutância e para a correlação de spin $S_\alpha S_\beta$ nos quadrantes (a) e (d) da figura 6.3 observamos que o estado ferro presente na região $-U < Vg_0 < 0$ impede o estabelecimento do regime Kondo no sistema e, como consequência, a condutância $G \approx 0.0$. Já na figura 6.7 observamos através das curvas contínua de cor preta em (a) e tracejada de cor vermelha em (b) que a condutância do sistema tende a seu valor máximo em $G \approx 1.0$ quando a correlação entre os spins dos PQ's laterais é anti-ferro.

Com o objetivo de melhor entender o papel desempenhado pelo efeito Kondo no processo de leitura da informação quântica, apresentamos na figura 6.6 um esquema onde é mostrado o mecanismo através do qual um elétron pode tunelar de um reservatório a outro nas duas possíveis configurações entre

os spins dos PQ's laterais. Em (A) a correlação entre esses spins é ferro e em (B) anti-ferro. No primeiro caso observamos que a troca na orientação do spin do PQ central, estado através do qual se realiza o transporte eletrônico e também estado intermediário de uma teoria perturbativa (quarta ordem) para o efeito Kondo que corresponde a uma energia maior que a do estado inicial. Esta energia maior $E_3 > E_1$, resultado da impossibilidade do elétron do PQ central de saltar aos PQ's vizinhos, já que a configuração em que os três elétrons estão com o mesmo spin concorre com a constituição do estado Kondo. Com essa configuração a condutância através do sistema vai praticamente a zero já que na ausência do efeito Kondo o sistema sai de ressonância. Já na configuração anti-ferro mostrada em (B) observamos que o transporte de elétrons entre os reservatórios, com troca na orientação de spin do elétron no PQ central, conserva a energia do sistema e é compatível com o estabelecimento do efeito Kondo. Nesse caso a condutância atinge seu valor máximo $G = \frac{2e^2}{h}$. Os diferentes comportamentos dos estados ferro, de $S_L \cong 1$, e anti-ferro de $S_L \cong 0$ faz da condutância a grandeza a ser utilizada no processo de leitura da informação quântica gravada no dispositivo.

O modelo de porta quântica que estamos propondo consiste em um dispositivo capaz de operar sobre um conjunto de dois qbits que, em nosso modelo, correspondem as projeções de spin dos PQ's laterais que podem se alinhar formando um estado ferro e outro anti-ferro, dependendo da ocupação do PQ central. No caso, vimos que o estado ferro de spin $S_L \cong 1$ é concorrente com o regime Kondo e impede o transporte de elétrons através do sistema, com a destruição do estado Kondo no regime molecular quando $t_{\alpha(\beta)} > t_{L(R)}$. Por outro lado, observamos a possibilidade de coexistência entre o regime Kondo e o estado anti-ferro de spin $S_L \cong 0$. A presença ou não do regime Kondo se reflete diretamente na condutância medida entre os reservatórios, de modo que o resultado obtido para essa grandeza carrega consigo a informação referente à configuração ferro ou anti-ferro dos spins dos PQ's externos.

6.3

Método dos bósons escravos

6.3.1

Hamiltoniano

O sistema de PQ's que estamos propondo é descrito por um Hamiltoniano tipo Anderson, escrito como

$$\begin{aligned}
 H = & \sum_{\substack{i=\alpha,\beta,0 \\ \sigma}} \epsilon_i n_{i\sigma} + \sum_{i=\alpha,\beta,0} U_i n_{i\sigma} n_{i\bar{\sigma}} + \sum_{i=L,R} t_i (c_{i\sigma}^\dagger c_{0\sigma} + c_{0\sigma}^\dagger c_{i\sigma}) + \sum_{\substack{i=\alpha,\beta \\ \sigma}} t_i (c_{i\sigma}^\dagger c_{0\sigma} + c_{0\sigma}^\dagger c_{i\sigma}) + \\
 & + \sum_{\substack{i=-1 \\ \sigma}}^{-\infty} t (c_{i\sigma}^\dagger c_{i-1\sigma} + c_{i-1\sigma}^\dagger c_{i\sigma}) + \sum_{\substack{i=1 \\ \sigma}}^{\infty} t (c_{i\sigma}^\dagger c_{i+1\sigma} + c_{i+1\sigma}^\dagger c_{i\sigma}), \tag{6-15}
 \end{aligned}$$

onde $c_{i\sigma}^\dagger (c_{i\sigma})$ é um operador que cria(destrói) um elétron de spin σ no sítio i . Ainda nesse Hamiltoniano os termos t_i , com $i = \alpha, \beta, L, R$, descrevem as conexões do PQ central com os reservatórios(L,R) e com os demais PQ's(α, β), enquanto que ϵ_i e U_i , com $i = \alpha, 0, \beta$, representam o estado local e a interação Coulombiana no i -ésimo PQ, respectivamente. Esse Hamiltoniano carrega consigo toda a informação física do sistema de três PQ's com o qual estamos trabalhando. Para extrair parte dessa informação, principalmente no que se refere as propriedades de transporte do sistema, aplicamos, como em toda esta tese, o método dos bósons escravos na aproximação de campo médio para U finito que foi discutido no segundo capítulo e que já aplicamos no estudo de sistemas mais simples, como no caso de um único PQ conectado a um reservatório de elétrons.

De acordo com o formalismo de bósons escravos introduzimos os operadores e_i , $p_{i\sigma}$ e d_i , bem como os multiplicadores de Lagrange λ_1^i e $\lambda_{2\sigma}^i$ com $i = \alpha, 0, \beta$ e, na aproximação de campo médio, escrevemos o Hamiltoniano acima como

$$\begin{aligned}
 H_{eff} = & \sum_{\substack{i=\alpha,\beta,0 \\ \sigma}} \epsilon_i c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma} + \sum_{i=\alpha,\beta,0} U_i \langle d_i \rangle^2 + \sum_{i=L,R} t_i Z_0 (c_{i\sigma}^\dagger c_{0\sigma} + c_{0\sigma}^\dagger c_{i\sigma}) + \\
 & + \sum_{\substack{i=\alpha,\beta \\ \sigma}} t_i Z_i Z_0 (c_{i\sigma}^\dagger c_{0\sigma} + c_{0\sigma}^\dagger c_{i\sigma}) + \sum_{\substack{i=-1 \\ \sigma}}^{-\infty} t (c_{i\sigma}^\dagger c_{i-1\sigma} + c_{i-1\sigma}^\dagger c_{i\sigma}) + \\
 & + \sum_{\substack{i=1 \\ \sigma}}^{\infty} t (c_{i\sigma}^\dagger c_{i+1\sigma} + c_{i+1\sigma}^\dagger c_{i\sigma}) + \sum_{\substack{i=\alpha,\beta,0 \\ \sigma}} \lambda_1^i (\langle e_i \rangle^2 + \langle p_{i\sigma} \rangle^2 + \langle d_i \rangle^2 - 1) + \\
 & + \sum_{\substack{i=\alpha,\beta,0 \\ \sigma}} \lambda_{2\sigma}^i (c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma} - \langle p_{i\sigma} \rangle^2 - \langle d_i \rangle^2), \tag{6-16}
 \end{aligned}$$

onde os parâmetros Z_0 e $Z_i Z_0$, com $i = \alpha, \beta$, são definidos em termos dos bósons escravos, como descrito no capítulo 2, e responsáveis pela renormalização das conexões do PQ central com os reservatórios e com os PQ's laterais, respectivamente.

6.3.2

Sistema de equações não lineares

Considerando a simetria $\alpha = \beta$ e $L = R$ e minimizando a energia livre F em relação aos bósons e aos multiplicadores de Lagrange definidos para cada PQ obtemos um sistema de 10 equações não lineares que devem ser resolvidas autoconsistentemente. Elas são:

$$\begin{aligned} \frac{\partial F}{\partial \langle e_\alpha \rangle} &= \sum_{\sigma} t_{\alpha} Z_0 \frac{\partial Z}{\partial \langle e_\alpha \rangle} (\langle c_{\alpha\sigma}^{\dagger} c_{0\sigma} \rangle + \langle c_{0\sigma}^{\dagger} c_{\alpha\sigma} \rangle) + 2\lambda_1^{\alpha} \langle e_\alpha \rangle = 0 \\ \frac{\partial F}{\partial \langle p_{\alpha\sigma} \rangle} &= t_{\alpha} Z_0 \frac{\partial Z}{\partial \langle p_{\alpha\sigma} \rangle} (\langle c_{\alpha\sigma}^{\dagger} c_{0\sigma} \rangle + \langle c_{0\sigma}^{\dagger} c_{\alpha\sigma} \rangle) + 2(\lambda_1^{\alpha} - \lambda_{2\sigma}^{\alpha}) \langle p_{\alpha\sigma} \rangle = 0 \\ \frac{\partial F}{\partial \langle d_\alpha \rangle} &= \sum_{\sigma} t_{\alpha} Z_0 \frac{\partial Z}{\partial \langle d_\alpha \rangle} (\langle c_{\alpha\sigma}^{\dagger} c_{0\sigma} \rangle + \langle c_{0\sigma}^{\dagger} c_{\alpha\sigma} \rangle) + 2(U + \lambda_1^{\alpha} - \lambda_{2\sigma}^{\alpha} - \lambda_{2\bar{\sigma}}^{\alpha}) \langle d_\alpha \rangle = 0 \\ \frac{\partial F}{\partial \lambda_1^{\alpha}} &= \langle e_\alpha \rangle^2 + \sum_{\sigma} \langle p_{\alpha\sigma} \rangle^2 + \langle d_\alpha \rangle^2 - 1 = 0 \\ \frac{\partial F}{\partial \lambda_{2\sigma}^{\alpha}} &= \langle c_{\alpha\sigma}^{\dagger} c_{\alpha\sigma} \rangle - \langle p_{\alpha\sigma} \rangle^2 - \langle d_\alpha \rangle^2 = 0, \end{aligned}$$

enquanto que, em relação aos bósons e aos multiplicadores definidos para o PQ central,

$$\begin{aligned} \frac{\partial F}{\partial \langle e_0 \rangle} &= \sum_{\substack{i=L,R \\ \sigma}} t_i \frac{\partial Z_0}{\partial \langle e_0 \rangle} (\langle c_{i\sigma}^{\dagger} c_{0\sigma} \rangle + \langle c_{0\sigma}^{\dagger} c_{i\sigma} \rangle) + \sum_{\substack{i=\alpha,\beta \\ \sigma}} t_i Z \frac{\partial Z_0}{\partial \langle e_0 \rangle} (\langle c_{i\sigma}^{\dagger} c_{0\sigma} \rangle + \langle c_{0\sigma}^{\dagger} c_{i\sigma} \rangle) + 2\lambda_1^0 \langle e_0 \rangle = 0 \\ \frac{\partial F}{\partial \langle p_{0\sigma} \rangle} &= \sum_{\substack{i=L,R \\ \sigma}} t_i \frac{\partial Z_0}{\partial \langle p_{0\sigma} \rangle} (\langle c_{i\sigma}^{\dagger} c_{0\sigma} \rangle + \langle c_{0\sigma}^{\dagger} c_{i\sigma} \rangle) + \sum_{\substack{i=\alpha,\beta \\ \sigma}} t_i Z \frac{\partial Z_0}{\partial \langle p_{0\sigma} \rangle} (\langle c_{i\sigma}^{\dagger} c_{0\sigma} \rangle + \langle c_{0\sigma}^{\dagger} c_{i\sigma} \rangle) + \\ &+ 2(\lambda_1^0 - \lambda_{2\sigma}^0) \langle p_{0\sigma} \rangle = 0 \\ \frac{\partial F}{\partial \langle d_0 \rangle} &= \sum_{\substack{i=L,R \\ \sigma}} t_i \frac{\partial Z_0}{\partial \langle d_0 \rangle} (\langle c_{i\sigma}^{\dagger} c_{0\sigma} \rangle + \langle c_{0\sigma}^{\dagger} c_{i\sigma} \rangle) + \sum_{\substack{i=\alpha,\beta \\ \sigma}} t_i Z \frac{\partial Z_0}{\partial \langle d_0 \rangle} (\langle c_{i\sigma}^{\dagger} c_{0\sigma} \rangle + \langle c_{0\sigma}^{\dagger} c_{i\sigma} \rangle) + \\ &+ 2(U_0 + \lambda_1^0 - \lambda_{2\sigma}^0 - \lambda_{2\bar{\sigma}}^0) \langle d_0 \rangle = 0 \\ \frac{\partial F}{\partial \lambda_1^0} &= \langle e_0 \rangle^2 + \sum_{\sigma} \langle p_{0\sigma} \rangle^2 + \langle d_0 \rangle^2 - 1 = 0 \\ \frac{\partial F}{\partial \lambda_{2\sigma}^0} &= \langle c_{0\sigma}^{\dagger} c_{0\sigma} \rangle - \langle p_{0\sigma} \rangle^2 - \langle d_0 \rangle^2 = 0. \end{aligned}$$

Resolvendo esse sistema de equações obtemos autoconsistentemente os valores médios dos bósons escravos e dos multiplicadores de Lagrange responsáveis por levar o sistema ao regime Kondo. Os seis valores médios a serem calculados, $\langle e_i \rangle$, $\langle p_{i\sigma} \rangle$ e $\langle d_i \rangle$, com $i = 0, \alpha(\beta)$, aparecem na estrutura de Z_0 e $Z_i Z_0$, que são responsáveis pela renormalização das conexões do PQ central com os reservatórios e com os PQ's laterais, respectivamente. O multiplicador $\lambda_{2\sigma}^i$

é responsável por levar o sistema ao regime Kondo através da renormalização do nível de energia local nos PQ's, perto do nível de Fermi, enquanto que λ_1^i tem o papel de restringir aos valores de zero, um e dois elétrons a ocupação do i -ésimo PQ, como discutido no segundo capítulo. Do ponto de vista prático a natureza não linear do sistema introduz uma série de dificuldades associadas ao aparecimento de picos muito estreitos nas DOS dos PQ's laterais, o que dificulta o processo de integração numérica. Esse tipo de dificuldade nos limita a trabalhar numa região relativamente pequena do espaço dos parâmetros, principalmente no que se refere ao valor da interação Coulombiana U , que ficou limitada a um valor máximo de 0.65, e das conexões $t_{\alpha(\beta)}$ do PQ central com os PQ's laterais que não podem ser muito pequenas quando comparadas com as conexões $t_{L(R)}$ com os reservatórios.

6.4

Funções de Green

Apresentamos abaixo as funções de Green que utilizamos nos cálculos auto-consistentes. No caso, adotamos $\epsilon_\alpha = \epsilon_\beta$, bem como $t_\alpha = t_\beta$ e $t_L = t_R$, de modo a considerar uma simetria entre $L - R$ e $\alpha - \beta$, reduzindo em número e tamanho as equações não lineares a serem resolvidas. As funções de Green locais obtidas para os PQ's laterais e central são dadas por

$$G_{\alpha\alpha}^\sigma = G_{\beta\beta}^\sigma = \frac{(1 - t_\beta^2 g_{0\sigma} g_{\beta\sigma} - t_L^2 g_{0\sigma} \tilde{g}_{L\sigma} - t_R^2 g_{0\sigma} \tilde{g}_{R\sigma}) g_{\alpha\sigma}}{1 - t_\alpha^2 g_{0\sigma} g_{\alpha\sigma} - t_\beta^2 g_{0\sigma} g_{\beta\sigma} - t_L^2 g_{0\sigma} \tilde{g}_{L\sigma} - t_R^2 g_{0\sigma} \tilde{g}_{R\sigma}} \quad (6-17)$$

e

$$G_{00}^\sigma = \frac{g_{0\sigma}}{1 - t_\alpha^2 g_{0\sigma} g_{\alpha\sigma} - t_\beta^2 g_{0\sigma} g_{\beta\sigma} - t_L^2 g_{0\sigma} \tilde{g}_{L\sigma} - t_R^2 g_{0\sigma} \tilde{g}_{R\sigma}}, \quad (6-18)$$

respectivamente. Já para as funções de Green não locais obtemos

$$G_{0\alpha}^\sigma = G_{0\beta}^\sigma = \frac{g_{0\sigma} t_\alpha g_{\alpha\sigma}}{1 - t_\alpha^2 g_{0\sigma} g_{\alpha\sigma} - t_\beta^2 g_{0\sigma} g_{\beta\sigma} - t_L^2 g_{0\sigma} \tilde{g}_{L\sigma} - t_R^2 g_{0\sigma} \tilde{g}_{R\sigma}} \quad (6-19)$$

e

$$G_{L0}^\sigma = G_{R0}^\sigma = \frac{\tilde{g}_L t_L g_0}{1 - t_\alpha^2 g_{0\sigma} g_{\alpha\sigma} - t_\beta^2 g_{0\sigma} g_{\beta\sigma} - t_L^2 g_{0\sigma} \tilde{g}_{L\sigma} - t_R^2 g_{0\sigma} \tilde{g}_{R\sigma}}. \quad (6-20)$$

Nestas expressões $g_{0(\alpha)(\beta)\sigma}$ é a função de Green de um corpo definida para o PQ $0(\alpha)(\beta)$ e $\tilde{g}_{L(R)\sigma} = \frac{\omega \pm \sqrt{\omega^2 - 4t^2}}{2t^2}$ é a função de Green que descreve os contatos metálicos L(R) do sistema.

A integral da parte imaginária das funções vestidas,

$$\langle n_{ij} \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \text{Im}g(G_{ij}^{\sigma}(\omega)) f_L(\omega) d\omega, \quad (6-21)$$

onde $i = 0, L, R, \alpha, \beta$, $j = 0, \alpha, \beta$ e $f_{L(R)}$ é a distribuição de Fermi dos reservatórios, que supomos em equilíbrio Termodinâmico, nos permite obter de forma auto-consistente os valores médios que aparecem no sistema de equações não lineares da seção anterior. Outra função de Green importante é a

$$G_{LR}^{\sigma}(\omega) = \frac{g_{L\sigma}^{\sim} t_L g_{0\sigma} t_R g_{R\sigma}^{\sim}}{1 - t_{\alpha}^2 g_{0\sigma} g_{\alpha\sigma} - t_{\beta}^2 g_{0\sigma} g_{\beta\sigma} - t_L^2 g_{0\sigma} \tilde{g}_{L\sigma} - t_R^2 g_{0\sigma} \tilde{g}_{R\sigma}}, \quad (6-22)$$

a partir da qual podemos calcular a condutância do sistema,

$$G(E_{fermi}) = -\frac{1}{2\pi} t^4 |G_{LR}^{\sigma}(E_{fermi})|^2, \quad (6-23)$$

onde E_{fermi} é o nível de Fermi nos reservatórios.

6.5 Resultados

Esta seção é dedicada ao estudo do comportamento físico do sistema em diferentes regimes. Mais especificamente apresentamos os resultados que obtivemos para a condutância, a densidade de estados local nos PQ's e os parâmetros Z_0 e ZZ_0 , responsáveis por renormalizar as conexões do PQ central com os PQ's laterais e com os contatos, respectivamente. Esses resultados são obtidos para diferentes conexões, temperaturas, e valores do potencial de porta aplicado ao PQ central.

Na figura 6.8 apresentamos um estudo a $T = 0$ mostrando o comportamento da DOS do PQ central para diferentes valores das conexões $t_{\alpha(\beta)}$ com os PQ's laterais. Este resultado é obtido com os potenciais de porta ajustados na posição de simetria partícula-buraco $V_{g0} = V_{g\alpha} = V_{g\beta} = -U/2$, com $U = 0.65$ e mostra uma mudança no comportamento do sistema que, com o aumento dessa conexão, passa de um estado característico de um regime Kondo de dois estágios $t_{\alpha(\beta)} < t_{L(R)}$ (17) a um estado molecular não Kondo $t_{\alpha(\beta)} \geq t_{L(R)}$ (17). A anti-ressonância observada na DOS do PQ central e o afastamento entre os estados ligado e não-ligado, característico do regime molecular, impossibilitam o transporte de elétrons através do PQ central da estrutura, que se comporta como um isolante. Veremos a seguir que, com o aumento da tem-

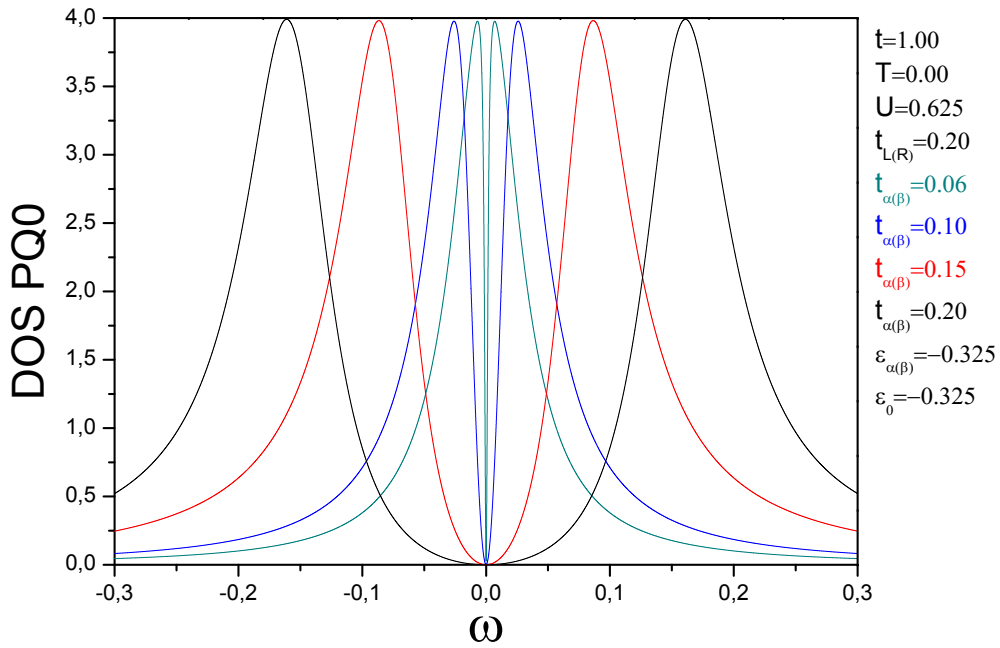


Figura 6.8: A figura apresenta as DOS's calculadas no PQ central para diferentes valores das conexões com os PQ's laterais . O resultado é obtido em $T=0$ e com o potencial de porta nos PQ's ajustado na posição de simetria $Vg_i = -U/2$, com $i = 0, \alpha, \beta$ e $U = 0.65$.

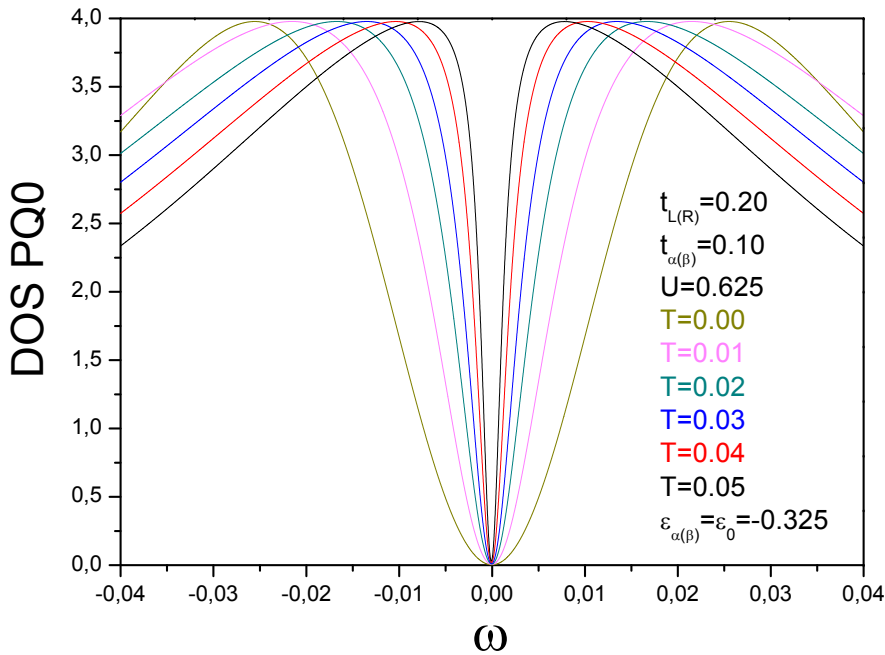


Figura 6.9: A figura apresenta a DOS calculada no PQ central para diferentes valores de temperatura. O potencial de porta aplicado nos PQ's foram ajustado na posição de simetria $Vg_i = -U/2$, com $i = 0, \alpha, \beta$ e $U = 0.65$.

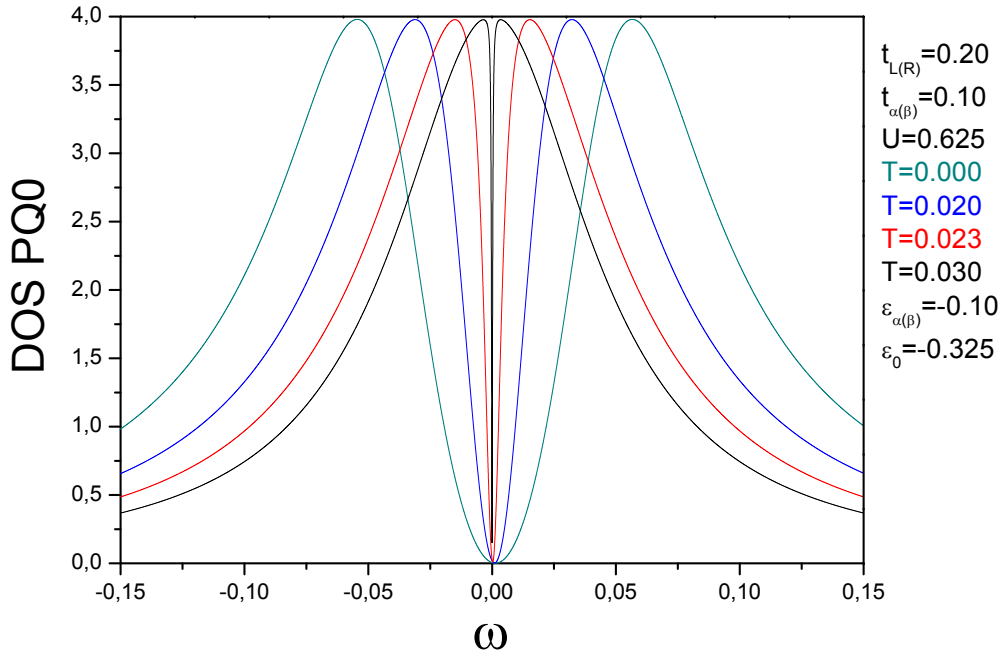


Figura 6.10: A figura apresenta a DOS calculada no PQ central para diferentes valores de temperatura. O potencial de porta aplicado nos PQ's foram ajustados de forma que $e_\alpha=e_\beta = -0.1$ e $e_0 = -0.325$, dessa vez fora da região de simetria partícula buraco.

peratura no regime Kondo o primeiro estágio é destruído e o sistema passa a conduzir. Por outro lado veremos que a mudança na temperatura interfere muito pouco nas propriedades de transporte através do sistema quando o mesmo se encontra num regime molecular confirmando que o sistema está fora do regime Kondo. Neste caso não existe uma temperatura característica T_K por cima da qual as propriedades do sistema, incluindo a condutância, mudam radicalmente como acontece quando o sistema está no regime Kondo. Nesse caso o transporte de elétrons permanece proibido independentemente da temperatura. Nesta configuração a estrutura de PQ's possui três elétrons e a correlação entre os PQ's laterais é ferromagnética (23).

As figuras 6.9 e 6.10 mostram a influência da temperatura nas DOS's dos PQ's obtidas com o potencial de porta do PQ central Vg_0 ajustado na posição de simetria partícula buraco $-U/2$ e os potenciais de porta dos PQ's laterais Vg_α e Vg_β em duas diferentes regiões do espaço das energias. No primeiro caso também colocamos esses potenciais em $-U/2$ enquanto que no segundo o sistema é considerado fora da simetria, com $Vg_\alpha = Vg_\beta = -0.1$. Ambos os resultados mostram claramente o sistema num regime Kondo de dois estágios (17), com temperaturas características T_{K1} e T_{K2} ($T_{K1} \gg T_{K2}$) que representam, respectivamente, o primeiro e o segundo estágio do regime. A largura da DOS do PQ central corresponde à primeira temperatura Kondo T_{K1}

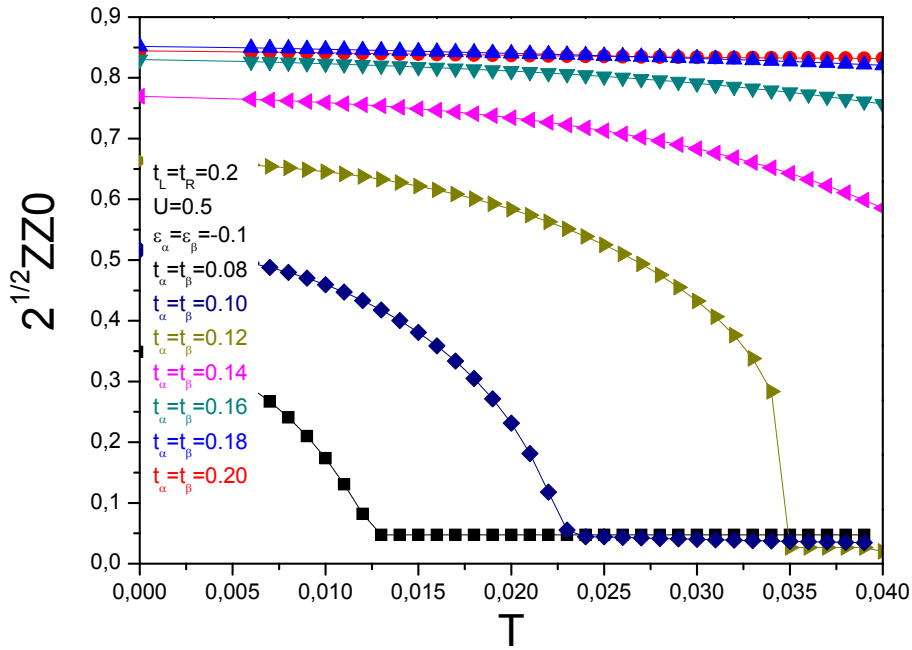


Figura 6.11: A figura mostra o comportamento com a temperatura do parâmetro ZZ_0 introduzido no contexto do formalismo dos bósons escravos e que é responsável por renormalizar a conexão com os PQ's laterais. Esse parâmetro é estudado com o sistema em diferentes regimes, definidos pela magnitude da conexão $t_{\alpha(\beta)}$.

enquanto que a largura da anti-ressonância observada nessa DOS, ou mesmo as larguras das DOS's calculadas para os PQ's laterais, como mostramos na figura 6.15 correspondem a T_{K2} .

Observamos que o aumento da temperatura do sistema destrói o segundo estágio do regime Kondo com o desaparecimento da anti-ressonância da DOS do PQ central na região próxima ao nível de Fermi. Vimos também, que o desaparecimento dessa anti-ressonância é acompanhado de um estreitamento na DOS dos PQ's laterais e que esse processo é mais intenso com o sistema fora da posição de simetria, que é o caso da figura 6.10. A transição do sistema de um regime Kondo de dois estágios para um regime Kondo de um estágio com o aumento da temperatura $T > T_{K2}$ permite a existência de estados no PQ central perto do nível de Fermi através dos quais os elétrons podem circular e, conseqüentemente, o tunelamento de elétrons entre os reservatórios. Como podemos observar, a partir do resultado da figura 6.11, esse comportamento se reflete no formalismo dos bósons escravos através da influência da temperatura no parâmetro ZZ_0 que conforme mencionamos em 6.3.2, é responsável pela renormalização das conexões com os PQ's laterais. O resultado apresenta um

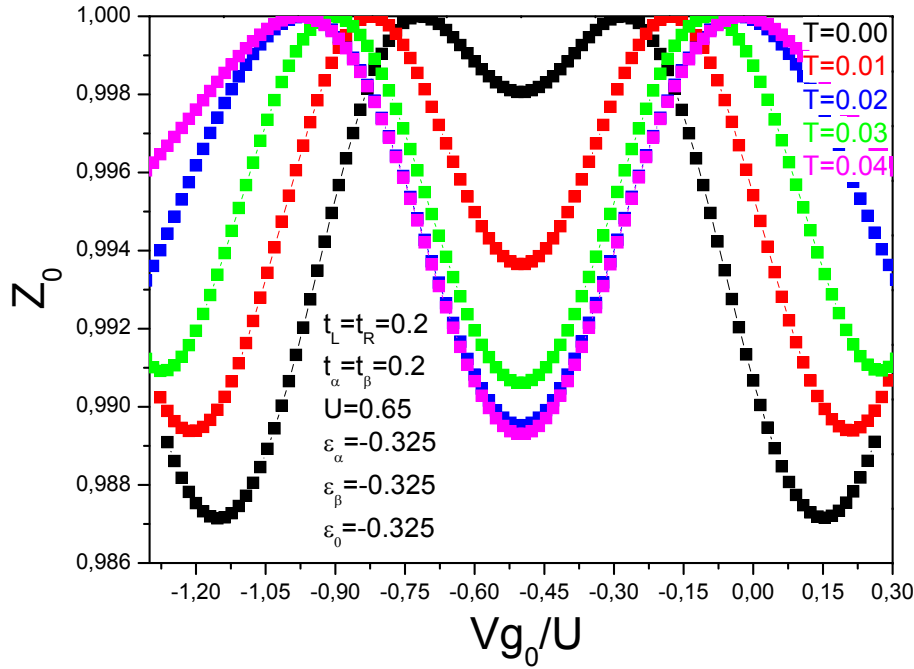


Figura 6.12: A figura mostra para diferentes temperaturas o comportamento de Z_0 em função do potencial de porta aplicado ao PQ central. Esse parâmetro é responsável por renormalizar a conexão do PQ central com os reservatórios. Este resultado é obtido com os potenciais de porta dos PQ's externos ajustados em $-U/2$, com $U = 0.65$.

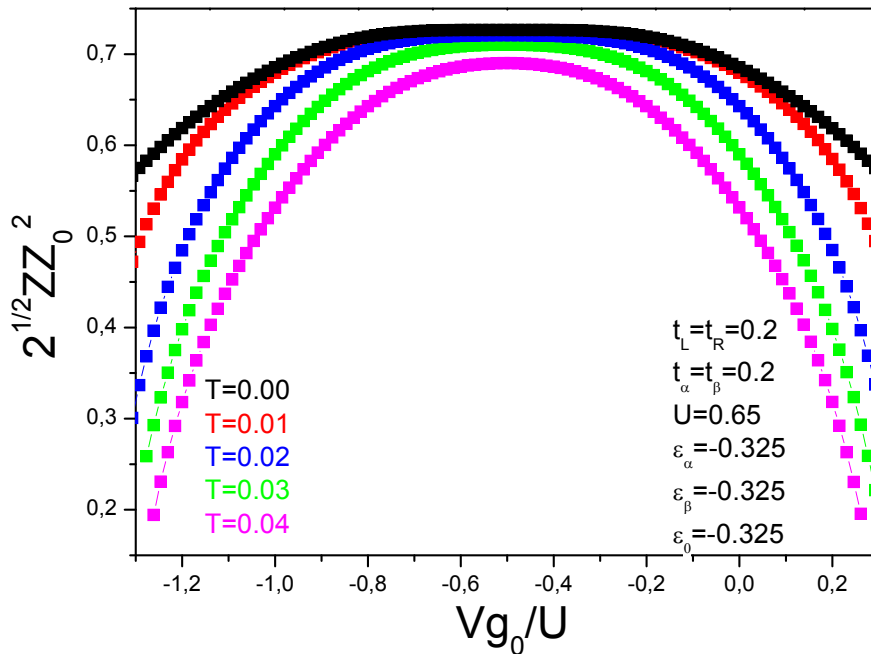


Figura 6.13: A figura mostra para diferentes temperaturas o comportamento de ZZ_0 em função do potencial de porta aplicado ao PQ central. Esse parâmetro é responsável por renormalizar a conexão entre o PQ central e os PQ's laterais. Esse resultado é obtido com os potenciais de porta dos PQ's externos ajustados em $-U/2$, com $U = 0.65$.

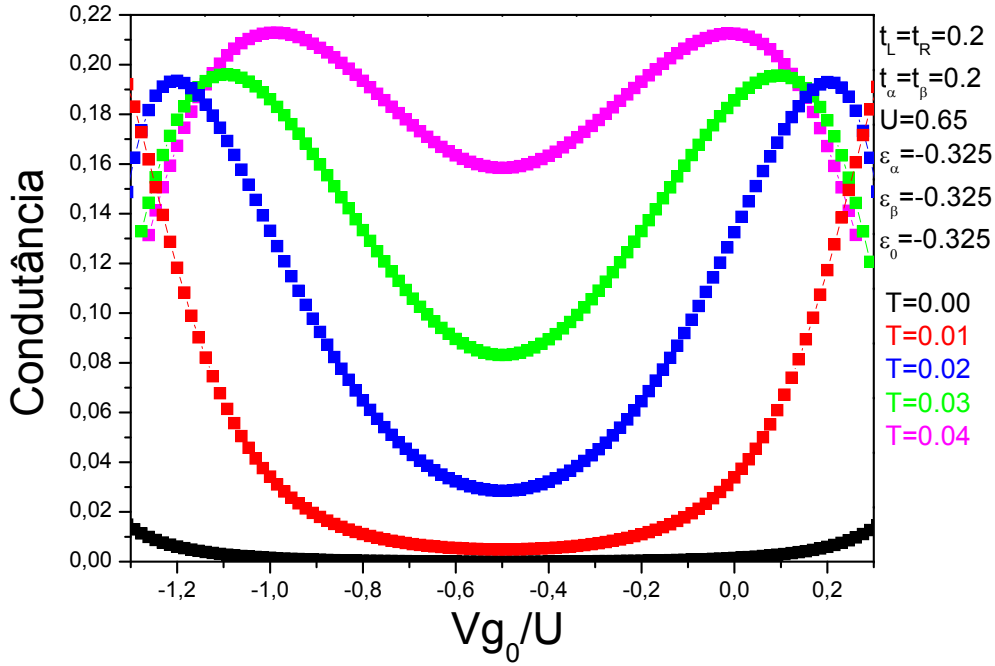


Figura 6.14: A figura mostra para diferentes valores de temperatura o comportamento da condutância em função do potencial de porta aplicado na base do PQ central. Esse resultado é obtido com os potenciais de porta ajustados $-U/2$, com $U = -0.65$, de forma a deixar o sistema na posição de simetria partícula buraco.

estudo desse parâmetro em função da temperatura para um potencial de porta aplicado aos PQ's de modo a deixar $\epsilon_{\alpha(\beta)} = -0.1$. Este valor permite estudar de uma forma clara o comportamento com a temperatura do sistema do regime Kondo de dois estágios ao regime molecular não Kondo conforme aumentamos o valor de $t_{\alpha(\beta)}$. No que se refere as conexões com os PQ's laterais observamos que, para $t_{\alpha(\beta)} \leq 0.14$, o parâmetro ZZ_0 vai rapidamente a zero com o aumento da temperatura, desconectando os PQ's laterais. Esse desacoplamento reflete a transição do sistema que passa de um regime Kondo de dois estágios para um regime Kondo de um estágio. Já para valores de $t_{\alpha(\beta)} > 0.14$ o sistema é encontrado num estado molecular que se apresenta praticamente invariante com o aumento da temperatura.

Na figura 6.13 apresentamos um estudo de ZZ_0 em função do potencial de porta Vg_0 aplicado no PQ central para diferentes valores de temperatura. De fato, observamos nesse resultado que entre $Vg_0 = -0.2$ e $Vg_0 = -0.8$, regiões em torno da simetria $Vg_0/U = -0.5$, com $U = 0.65$, a mudança com a temperatura é quase zero refletindo que o sistema para estes parâmetros está no regime molecular. Já para valores mais afastados dessa região o termo ZZ_0 fica bastante sensível com a temperatura, o que se reflete na transição para o regime Kondo de um estágio. Esta dependência com a temperatura não

aparece no Z_0 , responsável por renormalizar a conexão do PQ central com os contatos. O resultado da figura 6.12 mostra que esse parâmetro é praticamente independente da temperatura quando $t_{\alpha(\beta)} \sim t_{L(R)}$ independente do potencial de porta V_{g_0} .

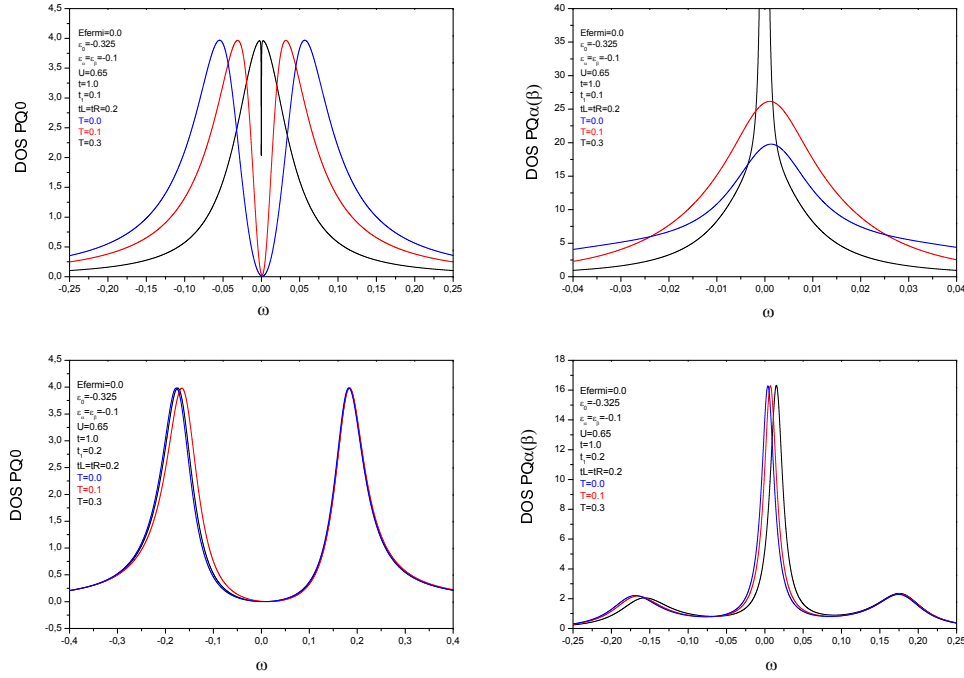


Figura 6.15: A figura mostra a variação com a temperatura da densidade de estados no PQ's 0, α e β calculada para o sistema em dois regimes diferentes. Em (A) o sistema apresenta uma anti-ressonância na DOS do PQ 0 caracterizando um efeito Kondo de dois estágios enquanto que em (B) o sistema apresenta dois picos que caracterizam o estado molecular. Vimos em (A) que o aumento da temperatura é responsável por recompor o buraco na DOS do PQ central, destruindo a anti-ressonância característica do efeito Kondo de dois estágios e provocando uma transição isolante-metal no regime do sistema. Em (B) vimos que, no regime molecular, o sistema permanece completamente insensível com o aumento da temperatura.

Num estudo mais detalhado apresentamos em 6.15 as DOS's dos PQ's em dois regimes diferentes, ambos obtidos com o sistema fora da posição de simetria. Em (A), para um valor relativamente pequeno das conexões laterais, observamos que em $T = 0$ o sistema se encontra num estado característico de um regime Kondo de dois estágios. Nesse caso, o aumento gradativo da temperatura reconstitui a anti-ressonância observada na DOS do PQ central, destruindo o primeiro estágio do regime Kondo, com temperatura T_{k1} , e levando o sistema a um regime que possibilita a condução de elétrons. Quanto aos PQ's laterais, observamos um pico de largura associada a T_{K2} e um

rápido estreitamento dele conforme a temperatura aumenta. Em (B) o sistema é considerado no regime molecular em $T = 0$ com um valor relativamente grande para as conexões laterais. Os resultados mostram que esse regime em nada se altera com o aumento da temperatura, ficando as DOS, tanto do PQ central como dos laterais, pouco alteradas com a temperatura. O comportamento observado pelo sistema nas duas situações que descrevemos reflete o comportamento das curvas que obtivemos para ZZ_0 na figura 6.11. Observamos nesse resultado que para $t_{\alpha(\beta)} = 0.1$ o aumento da temperatura provoca um decréscimo acentuado em ZZ_0 , diminuindo a conexão com os PQ's laterais e levando o sistema a um regime Kondo de um estágio. Já para $t_{\alpha(\beta)} = 0.2$ observamos que o aumento da temperatura praticamente não modifica ZZ_0 impossibilitando uma transição de regime.

A dependência com a temperatura e com o valor do potencial de porta aplicado em cada PQ, no que se refere aos parâmetros introduzidos pelo método dos bósons escravos e que renormalizam as conexões, está diretamente associada as propriedades de transporte do sistema e se reflete diretamente na condutância conforme apresentamos na figura 6.14. Adotamos um valor de $t_{\alpha(\beta)} > t_{L(R)}$ para que o sistema esteja num regime molecular de forma que a condutância fora da ressonância é praticamente zero independente da temperatura. Como já discutimos anteriormente esta é a situação na qual os PQ's externos estão acoplados ferromagneticamente e o sistema está fora do regime Kondo. Para este sistema a medição de uma condutância zero é uma forma de identificar que o sistema está com acoplamento ferro, e uma maneira de ler a informação contida nos spins. Para este mesmo sistema, um estado com correlação anti-ferro entre os spins externos teria dado, como já discutimos qualitativamente, um resultado oposto para a condutância, já que neste caso o sistema está no regime Kondo criando um canal para os elétrons circularem pelo dispositivo. Este resultado pode ser obtido facilmente acrescentando uma pequena interação anti-ferro $J = S_\alpha S_\beta$ com $J > 0$ o que permitiria estabilizar o estado antiferro como o estado fundamental do sistema. Embora este cálculo não tenha sido feito utilizando o método dos bósons escravos, mostramos na figura 6.7 o resultado da condutância utilizando o método LDECA (23), conformando que neste caso a condutância é $G = \frac{2e^2}{h}$ e mostrando claramente que uma medida da condutância nos permite ler a informação contida no sistema diferenciando claramente as correlações ferro e anti-ferro entre os spins externos.

6.6

Conclusões

Neste capítulo mostramos que um sistema de três pontos quânticos acoplados linearmente entre si e com o central conectado a contatos metálicos possui uma física muito rica. Dependendo do valor de seus parâmetros pode estar num regime Kondo de um estágio, ou de dois estágios com propriedades totalmente dependentes da temperatura, ou num regime molecular praticamente independente desta grandeza. Cada um destes regimes refletem acoplamentos diferentes entre os spins laterais. Como a correlação entre eles pode ser ferromagnética ou anti-ferromagnética dependendo do estado de carga do ponto quântico central que pode ser controlado manipulando o potencial de porta V_{g_0} este sistema é um forte candidato a atuar como uma porta lógica quântica. Por outro lado demonstramos também que a leitura do conteúdo da informação da porta quântica pode ser facilmente realizada medindo a condutância do sistema que depende, devido ao efeito Kondo, fortemente da correlação entre os spins.

7

Conclusões e perspectivas

Nesta tese utilizamos o formalismo dos bósons escravos na aproximação de campo médio para investigar as propriedades eletrônicas e de transporte em nanoestruturas de pontos quânticos. Em particular estudamos a física associada ao estabelecimento do regime Kondo em sistemas com um, dois e três PQ's interagentes que são conectados entre si e a contatos metálicos formando moléculas artificiais com diferentes topologias. Investigamos a potencialidade destas estruturas para serem utilizadas não apenas como plataforma de estudo para as diferentes variações do regime Kondo e de outro tipo de correlações mas também para funcionar como um dispositivo capaz de armazenar e processar a informação quântica contida na orientação dos spins dos PQ's interagentes. Esta perspectiva abre caminho para o desenvolvimento de uma porta lógica quântica, elemento fundamental para a construção do que seria o processador de um computador quântico.

A primeira estrutura considerada consiste de um PQ com interação Coulombiana U conectado a um reservatório de elétrons. Este é um sistema extensamente estudado e tem como único objetivo apresentar o método dos bósons escravos e descrever a forma de como a física Kondo é incorporada ao sistema através deste método. No contexto de uma aproximação de campo médio descrevemos o comportamento do multiplicador de Lagrange $\lambda_{2\sigma}$, responsável por renormalizar a energia do estado local ϵ_α no PQ interagente, e dos operadores bosônicos e_i , $p_{i\sigma}$ e d_i que projetam o sistema num estado ocupado com zero, um e dois elétrons e que estão associados a renormalização da conexão t_L com o reservatório através do parâmetro Z . Enfatizamos a importância do método dos bósons escravos na aproximação de campo médio no sentido de que este pode ser aplicado a sistema mais complexos de vários PQ's e, embora não considerado nesta tese, a situações fora de equilíbrio termodinâmico, fornecendo resultados excepcionalmente acurados e comparáveis quantitativamente com resultados exatos. É fundamental destacar que o formalismo é aplicado para uma situação onde a interação Coulombiana local é finita. Isto é de grande importância porque nos permite, de uma maneira natural, estudar a concorrência entre o efeito Kondo e as correlações magnéticas

entre os spins de uma estrutura de PQ's que no limite $U \rightarrow \infty$, muito usado na literatura, são eliminadas. Esta é a física que analisamos nesta tese, permitindo que o problema seja estudado de uma forma adequada sem acrescentar termos espúrios no Hamiltoniano, que não existem, e que são incorporados para recriar os efeitos magnéticos que o limite de $U \rightarrow \infty$ elimina. A simplicidade formal do método é proveniente do fato que o problema de muitos corpos é reescrito como o problema de um corpo. As dificuldades são derivadas das múltiplas variáveis auto-consistentes que devem ser resolvidas, o que implica num desafio numérico nada desprezível.

Também utilizamos o sistema de um PQ para estudar, na densidade de estados, a forma na qual o pico Kondo existente na impureza se propaga nos contatos metálicos. Mostramos que esta perturbação está associada a existência de uma nuvem chamada nuvem Kondo que se estende no interior destes contatos e cuja extensão ξ se relaciona com a temperatura Kondo T_K do sistema através da expressão $\xi = \alpha/T_K$, onde α é uma constante. Este é um conceito que não está ainda bem estabelecido na literatura e não existe, que saibamos, nenhum resultado experimental que confirme sua pertinência. Descrevemos toda uma metodologia para o cálculo da extensão ξ desta nuvem e para a obtenção de um valor estimado para a temperatura Kondo T_K do sistema baseado no cálculo da DOS no interior dos contatos. Comparando as DOS obtidas para o sistema dentro e fora do regime Kondo, propomos uma função $F(N)$ (onde N é o sítio da semi-cadeia infinita que representa o contato, medido a partir de sua borda) através da qual podemos extrair a extensão da nuvem Kondo. Para descrever a DOS fora do regime Kondo ($T > T_k$) utilizamos a solução Hubbard I¹. O resultado mais importante que obtivemos neste estudo foi verificar que a função $F(N)$ define uma distância característica ξ , de caráter universal, que só depende da temperatura Kondo T_k que satisfaz $\xi = \alpha/T_k$, onde $\alpha \cong 0.65$ para um PQ. Verificamos a concordância de nossos resultados com os obtidos através de dois outros métodos. No caso o método do aglomerado embebido ECA e do grupo de renormalização numérica NRG, ambos descritos nesta tese.

7.1

Molécula de dois PQ's

Estendemos o tratamento do problema Kondo a uma molécula de dois PQ's interagentes α e β . Embora este seja um problema extensamente estudado na literatura existem aspectos dele não bem entendidos. As fronteiras

¹No tratamento de sistemas mais complexos aproveitamos uma propriedade do método dos bósons escravos que desconecta a impureza para $T \gg T_k$ para compararmos as soluções Kondo ρ^K e não Kondo ρ^{nK} na construção da função $F(N)$.

entre o regime Kondo molecular de um elétron e o regime de concorrência entre o anti-ferromagnetismo e o efeito Kondo de dois elétrons é um deles. O outro é a constituição da nuvem Kondo e a partir dela como T_k depende dos parâmetros do sistema. Na molécula, cada PQ é ligado a um contato metálico e ao outro PQ através das conexões $t_{L(R)}$ e $t_{\alpha\beta}$, respectivamente. Como já mencionado a descrição da física Kondo neste sistema através do método dos bósons escravos a U finito não elimina a correlação de spin $J = t_{\alpha\beta}^2/U$ entre os PQ's interagentes permitindo estudar o processo de competição entre esta correlação e o regime Kondo formado pelo acoplamento com os spins dos elétrons de condução dentro dos contatos. Esse processo é regido pela concorrência entre duas escalas de energia características, a interação J e a temperatura Kondo T_K do sistema.

A natureza do regime quântico instalado no sistema de dois PQ's pode ser controlada ajustando a magnitude das conexões $t_{L(R)}$ e $t_{\alpha\beta}$ associadas, respectivamente, as duas escalas de energias que acabamos de comentar e a posição do estado local nos PQ's através de um potencial de porta $Vg_{\alpha(\beta)}$ aplicado na base destes PQ's. Para identificar estes regimes e entender algumas de suas propriedades básicas estudamos o comportamento de algumas grandezas como a condutância G , o nível renormalizado $\tilde{\epsilon}_{\alpha\beta}$ e o parâmetro Z , responsável por renormalizar as conexões entre as diferentes partes do sistema, em função do potencial de porta $Vg_{\alpha(\beta)}$ e para diferentes magnitudes da conexão $t_{\alpha\beta}$ entre os PQ's. Obtivemos a partir dos resultados que o sistema pode se apresentar em três diferentes regimes, que dependem da carga total e da magnitude de suas conexões. Para o sistema com dois elétrons verificamos a presença do regime Kondo quando $t_{\alpha\beta}$ é relativamente pequeno. Aumentando a magnitude desta conexão obtivemos a destruição deste regime e a transição do sistema a um estado molecular não Kondo de dois elétrons. Verificamos ainda na região de um e três elétrons a existência de um estado Kondo molecular. Caracterizamos a presença deste estado através dos platôs formados em $\tilde{\epsilon}_{\alpha\beta} = \pm \tilde{t}_{\alpha\beta}$ para valores relativamente grandes de $t_{\alpha\beta}$ e da condutância que atinge um valor próximo de seu máximo, $G \approx 1.0$, na região de $Vg_{\alpha(\beta)}$ onde ocorrem estes platôs. Obtivemos uma solução exata para o sistema desacoplado dos reservatórios. Esta solução nos auxiliou no sentido de identificar para um determinado valor de $t_{\alpha\beta}$ a região de $Vg_{\alpha(\beta)}$ onde ocorrem as flutuações de carga e os processos associados a transição do sistema de um regime quântico a outro.

Calculamos as DOS dentro dos contatos no processo de transição entre o regime Kondo e a interação anti-ferro na região de dois elétrons e obtivemos a função $F(N)$ para diferentes valores da conexão $t_{\alpha\beta}$ entre os PQ's. Observamos

que esta função apresenta um comportamento oscilatório que é envolto por uma exponencial e que resulta do acoplamento direto entre os PQ's através de $t_{\alpha\beta}$. Obtivemos a extensão ξ_i da nuvem Kondo e, conseqüentemente, a temperatura Kondo T_K do sistema através da inclinação da reta tangente as funções $\ln F(N)$ que obtivemos para diferentes valores de $t_{\alpha\beta}$. Os resultados mostraram que a temperatura Kondo do sistema aumenta com a magnitude desta conexão, apresentando um comportamento exponencial e que reflete, com a diminuição de ξ_i , a destruição da nuvem Kondo dentro dos reservatórios como conseqüência da interação $J = t_{\alpha\beta}^2/U$ entre os spins dos PQ's interagentes quando aumentamos $t_{\alpha\beta}$. Ainda no sistema de dois PQ's realizamos um estudo a temperatura finita. Neste estudo aproveitamos a propriedade do método dos bósons escravos de desacoplar o sistema quando sua temperatura atinge um determinado valor $T = T_c$, que chamamos de temperatura de corte e que, para pequenos valores da conexão $t_{\alpha\beta}$, é idêntica a temperatura Kondo obtida a partir da extensão da nuvem Kondo. Nesta região de $t_{\alpha\beta}$, o regime Kondo se encontra bem caracterizado e tanto T_c quanto T_K apresentam um comportamento exponencial em função de $t_{\alpha\beta}$.

7.2

Molécula de três pontos quânticos

Apresentamos uma molécula de três PQ's com dois PQ's interagentes α e β interligados indiretamente através de uma conexão t_0 com um terceiro PQ não interagente. Nesta molécula cada PQ interagente é conectado a um contato metálico através da conexão $t_{L(R)}$ formando uma estrutura em série. Estudamos as propriedades do sistema em função da posição do nível ϵ_0 do estado local do PQ 0 para diferentes valores da conexão t_0 com este PQ, supondo $Vg_{\alpha(\beta)} = -U/2$.

Obtivemos resultados para o nível renormalizado $\tilde{\epsilon}_{\alpha(\beta)}$ do PQ $\alpha(\beta)$, a condutância, a carga no PQ central e para o parâmetro Z que renormaliza as conexões do sistema. Também foram estudadas as grandezas em função de $Vg_{\alpha(\beta)}$ quando ϵ_0 é fixado em $\epsilon_0 = 0$. Analisando estes resultados identificamos na região de três elétrons a coexistência do regime Kondo com a correlação tipo ferro entre os spins dos elétrons nos PQ's interagentes independente da magnitude de t_0 . Na região de dois(ou quatro) elétrons observamos a natureza da interação anti-ferro que concorre com o estado Kondo. A orientação tipo ferro ou anti-ferro entre os spins dos PQ's interagentes para o sistema ocupado com três e duas(ou quatro) partículas, respectivamente, é melhor entendido pelos resultados que obtivemos de forma exata para o sistema desacoplado dos reservatórios e confirmada através do cálculo das correlações de spins

para o sistema completo realizadas utilizando o método LDECA². Estas duas soluções nos ajudaram a localizar as regiões onde ocorrem as flutuações de carga associadas a transição do sistema de um regime em que os spins nos PQ's interagentes se orientam de forma paralela e anti-paralela.

Os resultados que obtivemos para a molécula de três PQ's com spins em sítios interagentes α e β acoplados com um spin de condução no PQ central, não interagente, são importantes pois esclarecem que a correlação ferro é compatível com o regime Kondo e a anti-ferro é concorrente e tende a destruir este regime.

7.3

Sistema de três pontos quânticos como porta quântica

Na parte final desta tese estudamos uma molécula de três PQ's interagentes, α , 0 e β . Os PQ's α e β são conectados ao PQ central 0 através de uma conexão $t_{\alpha(\beta)}$. Este, por sua vez, é conectado a dois contatos metálicos através da conexão $t_{L(R)}$ formando uma estrutura de três PQ's em paralelo. Nós mostramos que este dispositivo é capaz de armazenar e processar a informação quântica contida no sinal da correlação magnética entre os spins dos PQ's α e β . Obtivemos que a natureza desta correlação depende da ocupação do PQ 0, sendo ferro quando este PQ é ocupado com um elétron e anti-ferro quando se encontrar vazio. Diferente do que obtivemos para a configuração em série, neste sistema a orientação anti-ferro entre os spins laterais é compatível com a instalação do regime Kondo e a orientação ferro é que concorre e eventualmente destrói este regime para valores relativamente grandes das conexões $t_{\alpha(\beta)}$ com os PQ's laterais. A presença ou não do regime Kondo no sistema está associada a natureza ferro ou anti-ferro da orientação relativa entre os spins dos PQ's laterais, informação esta que poderia ser obtida medindo-se a condutância, que é $G \approx 0.0$ no primeiro caso e $G \approx 1.0$ no segundo.

Para $t_{\alpha(\beta)}/t_{L(R)} < 1$ obtivemos um regime Kondo de dois estágios caracterizado por duas temperaturas Kondo, T_{k1} e T_{k2} , com $T_{k2} < T_{k1}$. Estas temperaturas foram identificadas com a largura da anti-ressonância no nível de Fermi e da própria largura da DOS calculada no PQ central. Aumentamos a temperatura T do sistema e obtivemos a destruição do segundo estágio do regime Kondo, com a recomposição da DOS no PQ central. Obtivemos com isso a transição do sistema ao estado Kondo de um estágio que permite o transporte de elétrons entre os contatos. Como consequência a condutância do sistema atinge um valor próximo do seu máximo em $G \approx 1.0$. Aumentando a magnitude das conexões $t_{\alpha(\beta)}$ com os PQ's laterais observamos a transição do

²Cálculos providenciados pelo professor George Martins, Oakland University.

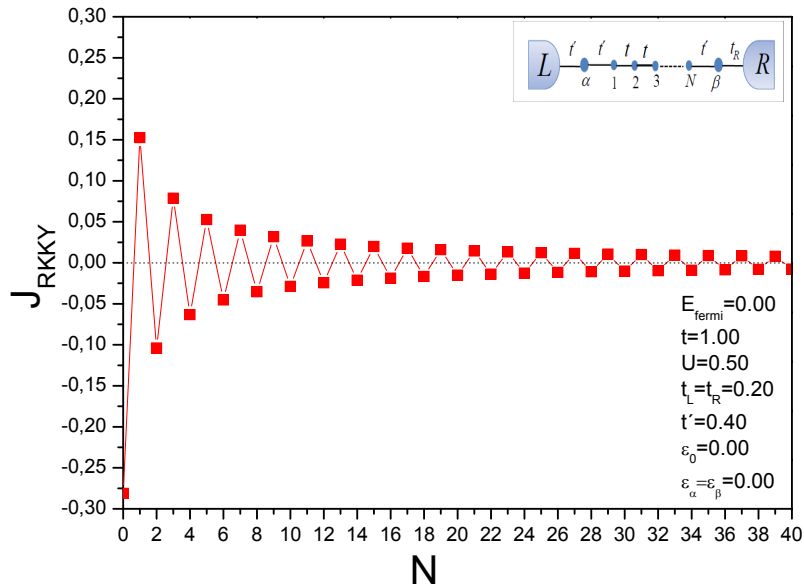


Figura 7.1: A figura mostra o comportamento oscilatório da interação RKKY em função do número N de sítios não interagentes da cadeia de PQ's colocada entre α e β . Este resultado foi obtido com $K_f = \pi/2$, valor que corresponde ao sistema com o nível de Fermi em zero.

sistema do regime Kondo de dois estágios ($t_{\alpha(\beta)} < t_{L(R)}$) ao regime molecular ($t_{\alpha(\beta)} > t_{L(R)}$), que fica inalterado com o aumento da temperatura e que consiste no regime adequado para o funcionamento desta estrutura como uma porta lógica quântica, tanto no processo quântico intrínseco da operação da porta como a leitura da sua informação.

7.4

Perspectivas futuras

As informações e ferramentas conceituais desenvolvidas no estudo do sistema de três PQ's em série, com dois PQ's interagentes, α e β , conectados de forma indireta através de um terceiro PQ não interagente 0, abrem caminho para um estudo mais completo da interação RKKY (77, 78), J_{RKKY} , quando uma cadeia de sítios não interagentes é colocada entre α e β . Este estudo permitirá entender as propriedades de transporte de dois PQ's em função da distância entre eles, da intensidade da interação e da posição do nível de Fermi. Esta disposição experimental, a mais simples possível, é a que no nosso ponto de vista permitiria uma medida direta da interação RKKY através de seus efeitos na condutância. A natureza da nuvem Kondo entre os PQ's, permitiria esclarecer aspectos do fenômeno Kondo que tem sido elusivos até o momento (Affleck, Siminin, Busser). Neste estudo a natureza ferro ou anti-ferro da correlação entre os spins destes PQ's, como já mencionamos, está relacionada ao número N de sítios da cadeia e a posição da energia de Fermi

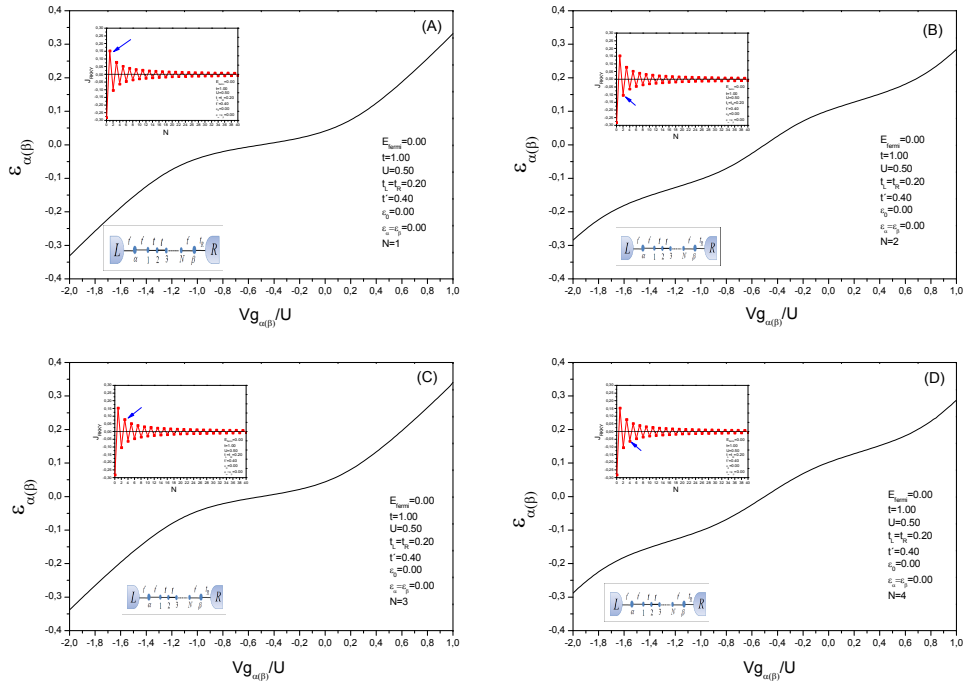


Figura 7.2: A figura mostra o comportamento do nível renormalizado $\tilde{\epsilon}_{\alpha(\beta)}$ em função do potencial de porta $Vg_{\alpha(\beta)}$ aplicado na base dos PQ's interagentes para o sistema com uma cadeia central de quatro diferentes tamanhos. Para os quadros (A), (B), (C) e (D) o comprimento da cadeia central e de $N = 1$, $N = 2$, $N = 3$ e $N = 4$, respectivamente. Em (A) e (C) o alinhamento entre os spins de α e β é ferro enquanto que em (B) e (D) é antiferro.

k_f . O valor de k_f é obtido a partir da expressão $E_f = 2t \cos(k_f a)$, que define a posição do nível de Fermi E_f . Nesta expressão a é a constante da rede e t a conexão entre os sítios das semi-cadeias que representam os contatos. Na figura 7.1 mostramos o comportamento oscilatório da interação RKKY em função de N que obtivemos através da expressão analítica $J_{RKKY}(k_f, N) \propto \pi/2 - Si(2k_f N)$ (74, 75, 76), com $k_f = \pi/2$ em consequência da escolha do nível de Fermi em $E_f = 0$. O gráfico da figura mostra a alternância ferro e anti-ferro na orientação dos spins dos PQ's interagentes. Foi possível mostrar que o acoplamento ferro ($J_{RKKY} > 0$) entre estes spins é compatível com o estabelecimento do regime Kondo e que o acoplamento anti-ferro ($J_{RKKY} < 0$) compete e pode eventualmente destruir este regime, dependendo dos valores atribuídos aos parâmetros que definem o sistema, em especial a magnitude da conexão t' com a estrutura central. Este comportamento é consistente com o obtido no estudo dos capítulos anteriores. Esta propriedade é verificada no resultado da figura 7.2, onde mostramos o comportamento do nível renormalizado $\tilde{\epsilon}_{\alpha(\beta)}$ em função do potencial de porta $Vg_{\alpha(\beta)}$ para quatro diferentes tamanhos da cadeia de

PQ's colocada entre α e β . Obtivemos neste resultado que o tradicional platô no nível de Fermi que caracteriza o estabelecimento do regime Kondo é obtido para os comprimentos associados a correlação ferro $J_{RKKY} > 0$ ((A) e (C)) e que esta estrutura não aparece para os comprimentos associados a correlação anti-ferro $J_{RKKY} < 0$ ((B) e (D)). Este comportamento mostra claramente a destruição do regime Kondo pela interação RKKY quando esta sustenta uma orientação anti-ferro entre os spins dos PQ's interagentes. Um estudo mais aprofundado da física associada a este fenômeno constitui um desdobramento natural e imediato desta tese. Outros desdobramentos possíveis são:

- O estudo dos fenômenos analisados nesta tese numa situação fora de equilíbrio termodinâmico quando o sistema está submetido a um potencial externo. Seria utilizado o formalismo de Keldysh que é de meu domínio e já foi extensamente utilizado na minha tese de mestrado para estudar o transporte eletrônico através de sistemas de PQ's fora de equilíbrio. Este estudo permitiria entender como o efeito Kondo, um fenômeno de equilíbrio, é destruído pelo potencial externo e como se conjuga este efeito com os outros apresentados nesta tese.

- Um aprofundamento da porta quântica proposta no capítulo 6 requeria um estudo dependente do tempo, para entender como os diferentes tempos envolvidos no processo de funcionamento desta porta se combinam e qual é exatamente o fator de mérito e a confiabilidade de seu funcionamento. Este estudo é claramente facilitado pelo fato do formalismo dos bósons escravos transformar um problema de muitos corpos num problema equivalente de um corpo. As grandezas auto-consistentes deveriam ser calculadas para cada instante de tempo na solução numérica da equação de Schroedinger, discretizado numericamente. O código numérico para a resolução deste problema já foi elaborado e faltaria o processamento numérico do problema.

- Nesta tese propusemos um método para o estudo da extensão da nuvem Kondo que foi aplicado a uma série de sistemas físicos constituídos por uma estrutura de PQ's. Estamos propondo a aplicação destes mesmos conceitos para o caso da interação RKKY entre dois PQ's situados a uma distância entre eles. Seria de grande interesse conceitual estudar a nuvem Kondo para outros sistemas como por exemplo: o Kondo de dois estágios, o Kondo sub e Super blindado, o Kondo com simetria SU(4), etc.

Referências Bibliográficas

- [1] S. Datta, *Electronic Transport in Mesoscopic Systems* (Cambridge University Press, Cambridge, England, 1995). S. Datta.
- [2] Laercio Costa Ribeiro, Dissertação de Mestrado "Transporte fora do equilíbrio em estruturas de pontos quânticos" PUC-Rio.
- [3] Ned S. Wingreen, *Science*, V.304, 1258-1259, 28 May 2004. 1.2
- [4] James R. Healyh and Mark A. Ratner, *Physics Today* pag. 43 maio (2003).
- [5] M. A. Kastner, *Physics Today* Pag. 24 January (1993). 1.2
- [6] U. Meirav, M. A. Kastner and S. J. Wind, *Phys. Rev. Lett.* 65, 771, (1990). 1.2
- [7] M. A. Kastner, *Ann. Phys. (Leipzig)*, 9 (2000) 11-12, 885-894. 1.2
- [8] M. A. Kastner J. H. F Scot-Thomas, S. B. Field, *Phys. Rev. Lett.*, 62:583, 1989.1.2
- [9] J. W. Gadzuk and M. Plihal. Quantum mirages in scanning tunneling spectroscopy of Kondo adsorbates: Vibrational signatures. 68:235413, 2003. 1.1
- [10] Leo Kouwenhoven and Leonid Glazman, "Revival of the Kondo effect", *Physics World*, January 2001. 1.1, 1.2
- [11] Sara M. Cronenwett, Tjerk H. Oosterkamp, Leo P. Kouwenhoven, *Science*, V. 281, P.540, 24 july (1998). 1.2
- [12] Lam H. Yu and Douglas Natelson, *Nano Letters*, V. 4. N.1 79-83, (2004).
- [13] D. Goldhaber-Gordon, Hadas Shtrikman, D. Mahalu, David Abusch-Magder, U. Meirav and M. A. Kastner, *Nature*, V. 391, 156-158, January (1998). 1.2
- [14] D. Goldhaber-Gordon, J. Gores, M. A. Kastner, Hadas Shtrikman, D. Mahalu, and U. Meirav, *PRL* V. 81 N.23 (1998). 1.2

- [15] A. Kogan, S. Amasha, D. Goldhaber-Gordon, G. Granger, M. A. Kastner, and Hadas Shtrikman, PRL, V. 93. N.16, (2004).
- [16] Wenjie Liang, Matthew P. Shores, Marc Bockrath, Jeffrey R. Long and Hongkun Park, Nature, Vol. 417, (2002).
- [17] E. V. Anda, G. Chiappe, C.A. Busser, M.A. Davidovich, G. B. Martins, . F. Heidrich-Meisner and E. Dagotto, Physical Review B 78, 085308 (2008) 1.2, 1.3, 4.1, 6.1, 6.1, 6.5, 6.5
- [18] R. M. Potok, I. G. Rau, Hadas Shtrikman, Yuval Oreg, D. Goldhaber Gordon, nature 05556, Vol 446, 8 March 2007 1.2, 1.3, 6.1
- [19] W. G. Van der Wiel, S. De Franceschi, J. M. Elzerman, S. Tarucha, and L. P. Kouwenhoven, Phys. Rev. Lett. 88, 12 (2002) 1.2
- [20] H. B. Heersche, Z. de Groot, J. A. Folk, L. P. Kouwenhoven, and H. S. J. van der Zant, arXiv:cond-mat/0508395 v1. 1.2
- [21] G. Granger, M. A. Kastner, Iuliana Radu, M. P. Hanson, and A. C. Gossard, Physical Review B 72, 165309 (2005). 1.2
- [22] A. Posazhennikova, B. Bayani, and P. Coleman, Physical Review B 75, 245329 (2007).
- [23] G. Chiappe, E. V. Anda, L. Costa Ribeiro, and E. Louis; Physical Review B 81, 041310 (R) (2010) 6.1, 6.2, 6.2.1, 6.2.1, 6.5, 6.5
- [24] 1A. Barenco, C. H. Bennett, R. Cleve, D. P. DiVincenzo, N. Margolus, P. Shor, T. Sleator, J. A. Smolin, and H. Weinfurter, Phys. Rev. A 52, 3457 (1995). 6.1, 6.2, 6.2.1
- [25] 2D. Loss and D. P. DiVincenzo, Phys. Rev. A 57, 120 (1998). 6.1
- [26] 8P. A. Orellana, G. A. Lara, and E. V. Anda, Phys. Rev. B 74, 193315 2006
- [27] Jörg Lehmann,¹ Alejandro Gaita-Ariño,¹ 2 Eugenio Coronado,² and Daniel Loss¹, Nature Nanotechnology 2, 312-317 1 May 2007 6.1, 6.2.1
- [28] P. S. Cornaglia and D. R. Grempel, Phys. Rev. B 71, 075305 (2005).
- [29] J. R. Petta, A. C. Johnson, J. M. Taylor, E. A. Laird, A. Yacoby, M. D. Lukin, C. M. Marcus, M. P. Hanson, and A. C. Gossard, Science 309, 2180 (2005) 6.1

- [30] P. Nordlander, M. Pustilnik, Y. Meir, N. S. Wingreen, and D. C. Langreth, *Phys. Rev. Lett.* 83, 808 1999 6.2.1
- [31] C. A. Büsser, G. B. Martins, L. Costa Ribeiro, E. Vernek, E. V. Anda, and E. Dagotto; *Physical Review B* 81, 045111 (2010)
- [32] Edson Verneck, Tese de Doutorado, "Propriedades de transporte de sistemas nanoscópicos: átomos e moléculas", PUC-Rio. 2, 1, 4.1
- [33] Bing Dong and X L Lei, *J. Phys.: Condens. Matter* 13 (2001) 9245-9258 2
- [34] G. Kotliar and A. E. Ruckenstein, *Phys. Rev. Lett.* 57, 1362 (1986) 2, 3.1, 4.1
- [35] D. M. Newns and N. Reed, *Advances in Physics* 36, 799 (1987) 2
- [36] W. G. van der Wiel, S. De Franceschi, J. M. Elzerman, T. Fujisawa, S. Tarucha, and L. P. Kouwenhoven, *Rev. Mod. Phys.* 75, 1 (2002)
- [37] C. A. Büsser, E. V. Anda, A. L. Lima, M. A. Davidovich, and G. Chiappe, *Phys. Rev. B* 62, 9907 (2000).
- [38] P. W. Anderson, *Phys. Rev.* 124, 41 (1961). 1.2, 2.1, 3.4.2, 4.1
- [39] J. Kondo, *Prog. Of theor. Phys.* 32, 37(1964). 3.4.2, 4.1
- [40] P. S. Cornaglia and D. R. Grempel. *Phys. Rev. B*, 71:075305, 2005. 4.1
- [41] Bing Dong and X. L. Lei. *Phys. Rev. B*, 65:241304(R), 2002. 4.5, 4.5.2 4.1
- [42] C. A. Busser, G. B. Martins, and K. A. Al-Hassanieh. 70:245303, 2004. 4.1
- [43] V. M. Apel, Maria A. Davidovich, and G. Chiappe. *Phys. Rev. B*, 72(12):125302, 2005. 4.1
- [44] A. C. Hewson. *The Kondo problem to heavy fermions*. Cambridge University Press, 1993. 1.2, 4.1, 4.4.3
- [45] Tomosuke Aono and Mikio Eto, *Physical Review B*, V. 63, 125327 4.1, 4.4.3
- [46] H. Jeong, A. M. Chang, M. R. Melloch, *Science* 293, 2221 (2001); 4.1

- [47] L. V. Keldysh. Diagram Technique for Nonequilibrium Processes. *Zh. Eksp. Teor. Fiz.*, 47:1515, 1964. 4.2.3
- [48] M. C. Rogge and R. J. Haug, *Phys. Rev. B* 77, 193306 (2008)
- [49] M. Hentschel, D. C. B. Valente, E. R. Mucciolo, and H. U. Baranger, *Phys. Rev. B* 76, 235309 (2007)
- [50] L. Gaudreau, S. A. Studenikin, A. S. Sachrajda, P. Zawadzki, A. Kam, J. Lapointe, M. Korkusinski, and P. Hawrylak, *Phys. Rev. Lett.* 97, 036807 (2006).
- [51] R. Zitko, J Bonca, A. Ramsak, and T. Rejec, *physical Review B*, V. 73. N.153307, (2006).
- [52] Goldhaber-Gordon, H. Shtrikman, D. Mahalu, D. Abusch-Magder, U. Meirav, and M. A. Kastner, *Nature London* 391,156 1998
- [53] E. S. Sørensen and I. Affleck, *Phys. Rev. B* 53, 9153 1996 3.1, 3.2
- [54] E. S. Sørensen and I. Affleck, *Phys. Rev. Lett.* 94, 086601 (2005) 3.1
- [55] H. C. Manoharan, C. P. Lutz, and D. M. Eigler, *Nature (London)* 403, 512 (2000)
- [56] J. E. Gubernatis, J. E. Hirsch, and D. J. Scalapino, *Phys. Rev. B* 35, 8478 1987 3.2
- [57] E. S. Sørensen and I. Affleck, arXiv:cond-mat/9508030 (unpublished); V. Barzykin and I. Affleck, *Phys. Rev. Lett.* 76, 4959 (1996); P. Simon and I. Affleck, *ibid.* 89, 206602 (2002); P.Simon and I. Affleck, *Phys. Rev. B* 68, 115304 (2003); K. Ingersent, A. W. W. Ludwig, and I. Affleck, *Phys. Rev. Lett.* 95, 257204 (2005) 3.2
- [58] I. Affleck, L. Borda, and H. Saleur, *Phys. Rev. B* 77, 180404(R) (2008) 3.3, 4.3
- [59] G. Bergmann, *Phys. Rev. B* 77, 104401 (2008); G. Bergmann, arXiv:0901.3347 (unpublished) 3.2
- [60] G. Bergmann, *Phys. Rev. B* 78, 195124 (2008)
- [61] C. J. Gazza, M. E. Torio, and J. A. Riera, *Phys. Rev. B* 73, 193108 (2006); S. Costamagna, C. J. Gazza, M. E. Torio, and J. A. Riera, *ibid.* 74, 195103 (2006) 3.2

- [62] L. Borda, Phys. Rev. B 75, 041307(R) (2007) 3.2
- [63] A. Holzner, I. McCulloch, U. Schollwöck, J. von Delft, and F. Heidrich-Meisner, arXiv:0906.2933 (unpublished)
- [64] J. Simonin, arXiv:0708.3604 (unpublished) 3.1, 3.2
- [65] V. Ferrari, G. Chiappe, E. V. Anda, and M. A. Davidovich, Phys. Rev. Lett. 82, 5088(1999). A. A. Busser, E. V. Anda, A. L. Lima, M. A. Davidovich, and G. Chiappe, Phys. Rev. B 62, 9907 (2000); C. A. Busser, G. B. Martins, K. A. Al-Hassanieh, A. Moreo, and E. Dagotto, Phys. Rev. B 70, 245303(2004); G. B. Martins, C. A. Busser, K. A. Al-Hassanieh, E. V. Anda, A. Moreo, and E. Dagotto, Phys. Rev. Lett. 96, 066802(2006). 3.1, 3.4.1
- [66] K. G. Wilson, Rev. Mod. Phys. 47 (1975) 773. 3.1
- [67] Comunicação privada, A. Holzner et al. 3.2
- [68] J. Hubbard, Proc. Roy. Soc. A 276, 238 (1963). 3.1, 3.3
- [69] E. Dagotto, Rev. Mod. Phys. 66, 763(1994). 3.4.1
- [70] K. Chen and C. Jayaprakash, Phys. Rev. B 52, 14436(1995). 3.4.2
- [71] R. A. Bulla, T. A. Costi, and T. Pruschke, Rev. Mod. Phys. 80, 395 (2008). 3
- [72] Peter Fulde, Electron Correlation in Molecules and Solids 5.5.3
- [73] Comunicação privada do professor George Martins da Universidade de Oakland, Michigan. 5.5.1
- [74] Y. Yafet, Phys. Rev. B V.36, N.7 (1987) 7.4
- [75] D. N. Aristov, Phys. Rev. B V.55, N.13 (1997) 5.1, 7.4
- [76] V. I. Litvinov* and V. K. Dugaev, Phys. Rev. B V. 58, (1998) 7.4
- [77] C. Kittel, Quantum theory of Solids (1963) 7.4
- [78] Martins GB, Busser CA, Al-Hassanieh KA, Anda EV, Moreo A, Dagotto E, Physical Review Letters 96 (6) 066802 (2006) 7.4
- [79] M. A. Ruderman; C. Kittel, Phys. Rev. 96, 99(1954) 3.1
- [80] T. Kasuya, Prog. Of Theor. Phys. 16, 45 (1956) 3.1
- [81] K. Yosida, Phys. Rev. 107, 396 (1954) 3.1

Livros Grátis

(<http://www.livrosgratis.com.br>)

Milhares de Livros para Download:

[Baixar livros de Administração](#)

[Baixar livros de Agronomia](#)

[Baixar livros de Arquitetura](#)

[Baixar livros de Artes](#)

[Baixar livros de Astronomia](#)

[Baixar livros de Biologia Geral](#)

[Baixar livros de Ciência da Computação](#)

[Baixar livros de Ciência da Informação](#)

[Baixar livros de Ciência Política](#)

[Baixar livros de Ciências da Saúde](#)

[Baixar livros de Comunicação](#)

[Baixar livros do Conselho Nacional de Educação - CNE](#)

[Baixar livros de Defesa civil](#)

[Baixar livros de Direito](#)

[Baixar livros de Direitos humanos](#)

[Baixar livros de Economia](#)

[Baixar livros de Economia Doméstica](#)

[Baixar livros de Educação](#)

[Baixar livros de Educação - Trânsito](#)

[Baixar livros de Educação Física](#)

[Baixar livros de Engenharia Aeroespacial](#)

[Baixar livros de Farmácia](#)

[Baixar livros de Filosofia](#)

[Baixar livros de Física](#)

[Baixar livros de Geociências](#)

[Baixar livros de Geografia](#)

[Baixar livros de História](#)

[Baixar livros de Línguas](#)

[Baixar livros de Literatura](#)
[Baixar livros de Literatura de Cordel](#)
[Baixar livros de Literatura Infantil](#)
[Baixar livros de Matemática](#)
[Baixar livros de Medicina](#)
[Baixar livros de Medicina Veterinária](#)
[Baixar livros de Meio Ambiente](#)
[Baixar livros de Meteorologia](#)
[Baixar Monografias e TCC](#)
[Baixar livros Multidisciplinar](#)
[Baixar livros de Música](#)
[Baixar livros de Psicologia](#)
[Baixar livros de Química](#)
[Baixar livros de Saúde Coletiva](#)
[Baixar livros de Serviço Social](#)
[Baixar livros de Sociologia](#)
[Baixar livros de Teologia](#)
[Baixar livros de Trabalho](#)
[Baixar livros de Turismo](#)