

# 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,

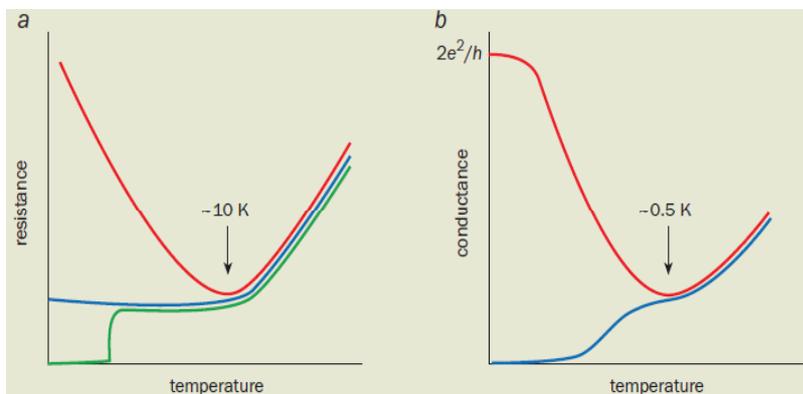


Figura 1.1: A figura mostra em (a) o comportamento da resistividade elétrica em função da temperatura para três tipos de materiais. A curva de cor verde mostra uma queda abrupta da resistividade com a temperatura, característica do fenômeno da supercondutividade apresentado por materiais como alumínio 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

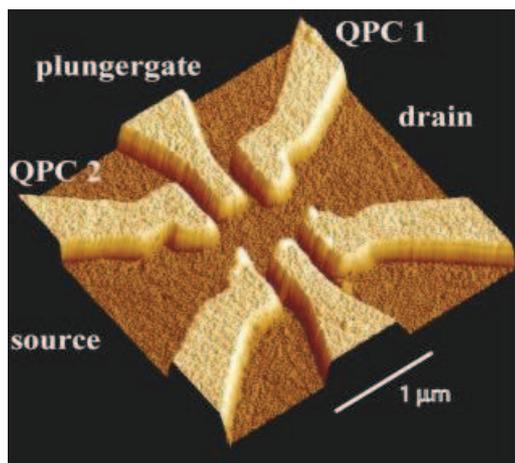


Figura 1.2: A figura apresenta uma estrutura de um PQ conectado a contatos metálicos. O ajuste dos potenciais elétricos aplicados a partir destes contatos permite o controle sobre os parâmetros que definem o PQ, como o número de elétrons e a magnitude das conexões do sistema.

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 <sup>1</sup>, 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

<sup>1</sup>Algumas 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.

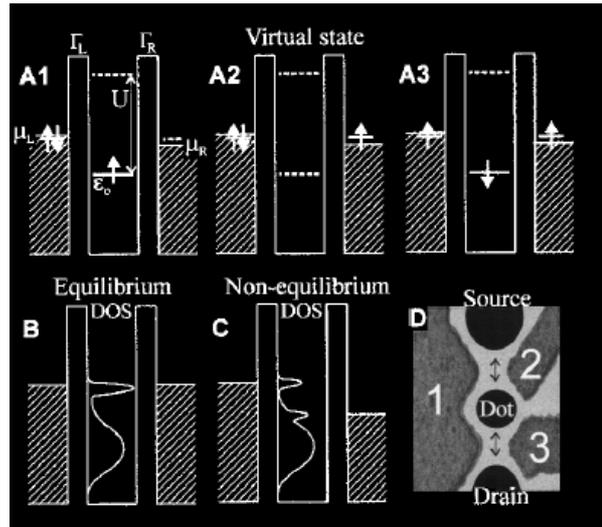


Figura 1.3: A figura apresenta em (D) a estrutura de um PQ conectado a contatos metálicos. Em (A) temos um perfil de energia mostrando o bloqueio de Coulomb no PQ e um estado virtual que precisa ser criado para que o sistema possa conduzir no regime Kondo. Em (b) e (c) temos, respectivamente, o perfil 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,  $\Gamma$  é a constante de acoplamento entre o PQ e os contatos e  $\epsilon$  é a energia do estado local no PQ (10). O controle de  $\Gamma$ ,  $U$  e  $\epsilon$  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.

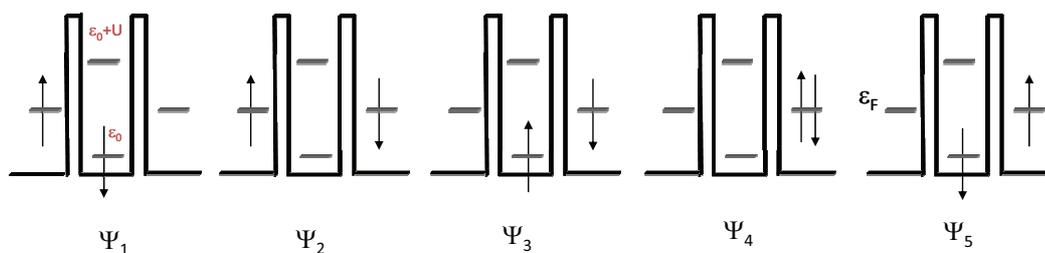


Figura 1.4: A figura mostra os quatro estágios referentes ao processo de um elétron passar do reservatório da esquerda para o reservatório da direita através de um PQ sem sofrer a repulsão Coulombiana já que em momento nenhum o PQ está duplamente ocupado. Este processo caracteriza o efeito Kondo.

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 <sup>2</sup>(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  $\epsilon$ , 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, entre

<sup>2</sup>Ver equação 2.1 do próximo capítulo.

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  $\psi_2$ ,  $\psi_3$  e  $\psi_4$  na transição de um estado  $\psi_1$  para outro de mesma energia  $\psi_5$ . 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  $\psi_A$  de spin total  $S = 0$ . Para que os elementos de matriz sejam diferentes de zero, como o Hamiltoniano conserva o spin, o estado inicial  $\psi_1$  e final  $\psi_5$  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

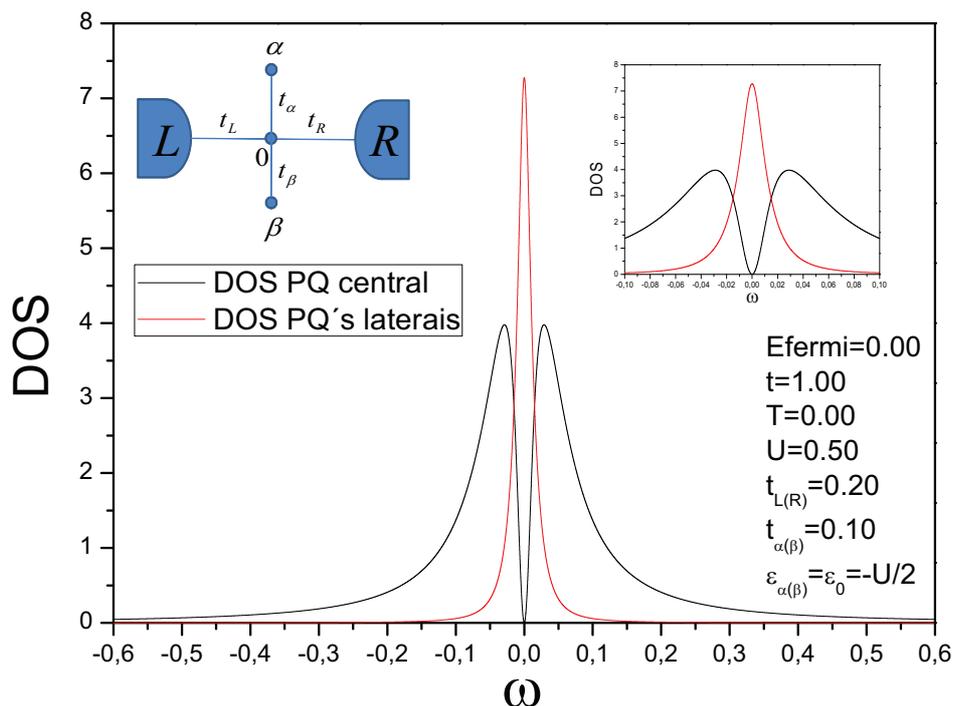


Figura 1.5: A figura mostra na curva de cor preta a anti-ressonância na DOS do PQ central característica do efeito Kondo de dois estágios que obtivemos no sistema de três PQ's estudado no capítulo seis. A curva de cor vermelha mostra a DOS calculadas nos PQ's laterais.

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

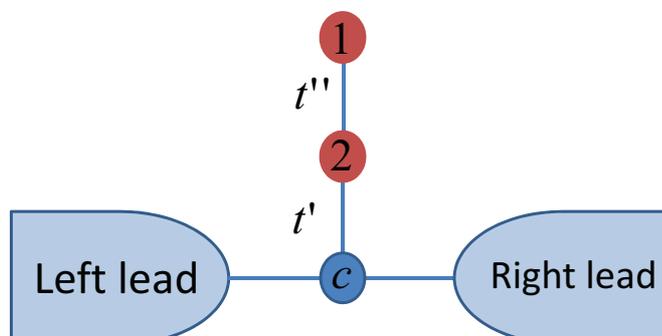


Figura 1.6: A figura mostra o sistema de dois PQ's com interação Coulombiana  $U$  conectados lateralmente a uma cadeia infinita de PQ's não interagentes.

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

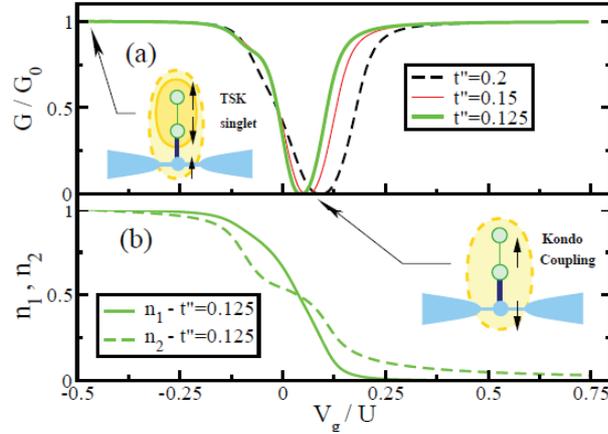


Figura 1.7: A figura mostra em (a) a condutância calculada para três diferentes valores da conexão  $t''$ , com  $t'' < t'$  ( $U = 1.0$ ,  $t' = 0.3$ ) e em (b) a carga em cada PQ, ambos em função do potencial de porta  $Vg$  aplicado na base dos PQ's.

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 LDECA<sup>3</sup>. 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

<sup>3</sup>Logarithm Discretization Embedded Cluster Approximation.

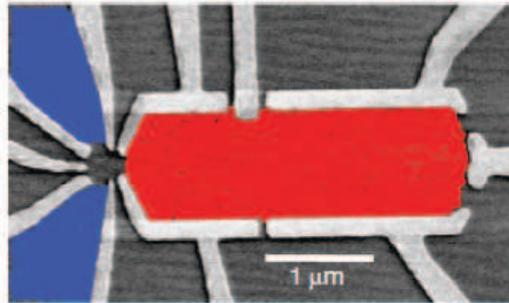


Figura 1.8: A figura mostra um PQ conectado a dois reservatórios de elétrons (em azul) e a um PQ maior (em vermelho). O PQ maior funciona como um reservatório finito de elétrons e tem como função a acessibilidade do regime Kondo de dois estágios pelo sistema.

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  $J_{r,f}$  (reservatório finito) entre o spin do PQ e os spins dos elétrons nesse reservatório. O regime Kondo de dois estágios é acessado quando  $J_{r,f} = J_{r,i}$ . 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 ( $J_{r,f} > J_{r,i}$  ou  $J_{r,f} < J_{r,i}$ ) 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.