



**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



**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  $\xi$ . Mostramos que  $\xi$  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  $\xi$ . We prove that  $\xi$  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  $\xi$  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	<b>19</b>
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.	<b>30</b>
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.	<b>40</b>
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.	<b>59</b>
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	<b>85</b>
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).	88
5.5	Resultados	93
5.6	Conclusões	112
6	Efeito Kondo e correlação eletrônica num sistema de três PQ's interagentes	<b>114</b>
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	<b>139</b>
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  $Vg_\alpha$  aplicado na base do PQ. 32
- 2.3 A figura mostra os valores médios dos operadores  $e_\alpha$ ,  $p_{\alpha\sigma}$  e  $d_\alpha$  em função do potencial de porta  $Vg_\alpha$  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  $V_\alpha$  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  $\Gamma$ . Em (a) temos a extrapolação de  $F(N)$  ao limite termodinâmico para cada valor de  $\Gamma$  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  $\Delta$  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  $\Delta$  calculado com os bósons escravos e com ECA. Diferentes valores de  $U$  foram utilizados com ECA. Observamos que, quando  $\Delta$  é pequeno, todas as curvas coincidem, como esperado, se pensarmos em termos do caráter universal que caracteriza o efeito Kondo. Aumentando  $\Delta$  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  $\alpha$  e  $\beta$  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  $\epsilon_0$  dos PQ's e destaca a existência de três regiões no espaço de  $\epsilon_0$ , que correspondem a valores de  $\epsilon_0$  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 antiferro 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 antiferro 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 logaritmo 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,  $\alpha$  e  $\beta$ , 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  $\alpha$  e  $\beta$  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 antiferro 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  $\epsilon_{\alpha(\beta)} = -U/2$ . 94
- 5.5 A figura mostra a correlação de spin entre as diferentes partes do sistema de três PQ's que estamos tratando neste capítulo. 95
- 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  $\epsilon_0$  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  $\epsilon_{\alpha(\beta)} = -U/2$ . 98
- 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  $\epsilon_{\alpha(\beta)} = -U/2$ . 99
- 5.10 A figura mostra o comportamento do parâmetro  $1 - Z^2$  em função da conexão  $t_0$  para diferentes posições do nível local  $\epsilon_0$  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  $\epsilon_0$  do PQ central. Para este resultado os níveis de energia dos PQ's laterais são colocados em  $\epsilon_{\alpha(\beta)} = -U/2$ . 101

- 5.12 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  $t_0$ . 102
- 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  $\epsilon_{\alpha(\beta)} = -U/2$ . 103
- 5.14 A figura mostra o comportamento da DOS local nos PQ's interagentes  $\alpha$  e  $\beta$  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  $\epsilon_{\alpha(\beta)} = -U/2$ . 104
- 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  $\Phi_1$ ,  $\Phi_2$  e  $\Phi_3$  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. 107
- 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. 109
- 5.19 A figura mostra o inverso da extensão  $\xi_i$  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. 112
- 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,  $\alpha$  e  $\beta$ , 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 antiferro. 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  $\beta$  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  $\alpha$  e  $\beta$ . 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  $\alpha$  e  $\beta$  é ferro enquanto que em (B) e (D) é antiferro.

145

*"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*