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

PUC-Rio - Certificação Digital Nº 0510943/CA

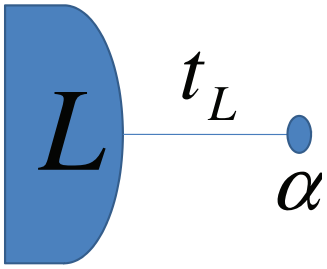

Figura 2.1: A figura mostra um sistema composto por um simples PQ conectado a um contato metálico.

um Hamiltoniano tipo de Anderson (38), escrito como

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

Nesse Hamiltoniano $c^\dagger_{\alpha\sigma}$ 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 $e^\dagger_\alpha(e_\alpha)$, $p^\dagger_{\alpha\sigma}(p_{\alpha\sigma})$, e $d^\dagger_\alpha(d_\alpha)$. 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

PUC-Rio - Certificação Digital Nº 0510943/CA

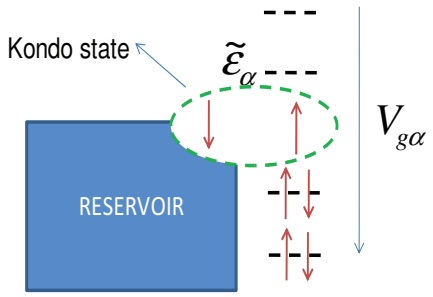

Figura 2.2: A figura mostra o reservatório de elétrons representado pelo contato metálico e os níveis de energia no PQ, controlados através do potencial de porta Vg_α aplicado na base do PQ.

$$P_\alpha \equiv e^\dagger_\alpha e_\alpha + \sum_\sigma p^\dagger_{\alpha\sigma} p_{\alpha\sigma} + d^\dagger_\alpha d_\alpha - 1 = 0 \tag{2-2}$$

e

$$Q_\alpha \equiv c^\dagger_{\alpha\sigma} c_{\alpha\sigma} - p^\dagger_{\alpha\sigma} p_{\alpha\sigma} - d^\dagger_\alpha d_\alpha = 0. \tag{2-3}$$

Esses vínculos são inseridos no Hamiltoniano através dos multiplicadores de Lagrange λ_1 e $\lambda_{2\sigma}$ e correspondem, respectivamente, a relação de completeza 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

$$\begin{aligned} |0_\alpha\rangle &= e^\dagger_\alpha |vac\rangle \\ |\sigma_\alpha\rangle &= c^\dagger_{\alpha\sigma} p^\dagger_{\alpha\sigma} |vac\rangle \\ |d_\alpha\rangle &= c^\dagger_{\alpha\sigma} c^\dagger_{\alpha\bar{\sigma}} d^\dagger_\alpha |vac\rangle. \end{aligned} \tag{2-4}$$

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 $c^\dagger_{\alpha\sigma}$ e $c_{\alpha\sigma}$ devem ser hibridizados com os bósons escravos,

$$c^\dagger_{\alpha\sigma} \rightarrow c^\dagger_{\alpha\sigma} Z^\dagger_{\alpha\sigma} \tag{2-5}$$

$$c_{\alpha\sigma} \rightarrow Z_{\alpha\sigma} c_{\alpha\sigma}. \tag{2-6}$$

PUC-Rio - Certificação Digital Nº 0510943/CA

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

$$Z_{\alpha\sigma} = [1 - d^\dagger_\alpha d_\alpha - p^\dagger_{\alpha\sigma} p_{\alpha\sigma}]^{-\frac{1}{2}} (e^\dagger_\alpha p_{\alpha\sigma} + p^\dagger_{\alpha\bar{\sigma}} d_\alpha)[1 - d^\dagger_\alpha d_\alpha - p^\dagger_{\alpha\sigma} p_{\alpha\sigma}]^{-\frac{1}{2}}, \quad (2\text{-}7)$$

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

$$\begin{aligned} H_{eff} &= \sum_\sigma \epsilon_\alpha c^\dagger_{\alpha\sigma} c_{\alpha\sigma} + U d^\dagger_\alpha d_\alpha + t_L \sum_\sigma (c^\dagger_{\alpha\sigma} Z^\dagger_{\alpha\sigma} c_{L\sigma} + c^\dagger_{L\sigma} Z_{\alpha\sigma} c_{\alpha\sigma}) + \\ &+ \sum_{\substack{i=-1 \\ \sigma}}^{-\infty} t(c^\dagger_{i\sigma} c_{i-1\sigma} + c^\dagger_{i-1\sigma} c_{i\sigma}) + \lambda^\alpha_1 (e^\dagger_\alpha e_\alpha + \sum_\sigma p^\dagger_{\alpha\sigma} p_{\alpha\sigma} + d^\dagger_\alpha - 1) + \\ &+ \sum_\sigma \lambda^\alpha_{2\sigma} (c^\dagger_{\alpha\sigma} c_{\alpha\sigma} - p^\dagger_{\alpha\sigma} p_{\alpha\sigma} - d^\dagger_\alpha d_\alpha), \end{aligned} \quad (2\text{-}8)$$

onde λ^α_1 e $\lambda^\alpha_{2\sigma}$ 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 $e^\dagger_\alpha(e)$, $p^\dagger_{\alpha\sigma}(p_{\alpha\sigma})$, e $d^\dagger_\alpha(d)$ e substituímos esses operadores por seus respectivos valores médios. Com esta aproximação o Hamiltoniano efetivo fica escrito como:

$$\begin{aligned} \langle H_{eff} \rangle &= \sum_\sigma \epsilon_\alpha c^\dagger_{\alpha\sigma} c_{\alpha\sigma} + U \langle d_\alpha \rangle^2 + \sum_\sigma t_L \bar{Z}_\sigma (c^\dagger_{\alpha\sigma} c_{L\sigma} + c^\dagger_{L\sigma} c_{\alpha\sigma}) + \\ &+ \sum_{j=-\infty}^{-1} t(c^\dagger_{i\sigma} c_{i-1\sigma} + c^\dagger_{i-1\sigma} c_{i\sigma}) + \lambda^\alpha_1 (\langle e_\alpha \rangle^2 + \sum_\sigma \langle p_{\alpha\sigma} \rangle^2 + \langle d_\alpha \rangle^2 - 1) + \\ &+ \sum_\sigma \lambda^\alpha_{2\sigma} (\langle c^\dagger_{\alpha\sigma} c_{\alpha\sigma} \rangle - \langle p_{\alpha\sigma} \rangle^2 - \langle d_\alpha \rangle^2). \end{aligned} \quad (2\text{-}9)$$

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 $\lambda^\alpha_{2\sigma}$, resultando num nível efetivo de energia $\tilde{\epsilon_\alpha} = \epsilon_\alpha + \lambda^\alpha_2$, 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,

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

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

PUC-Rio - Certificação Digital Nº 0510943/CA

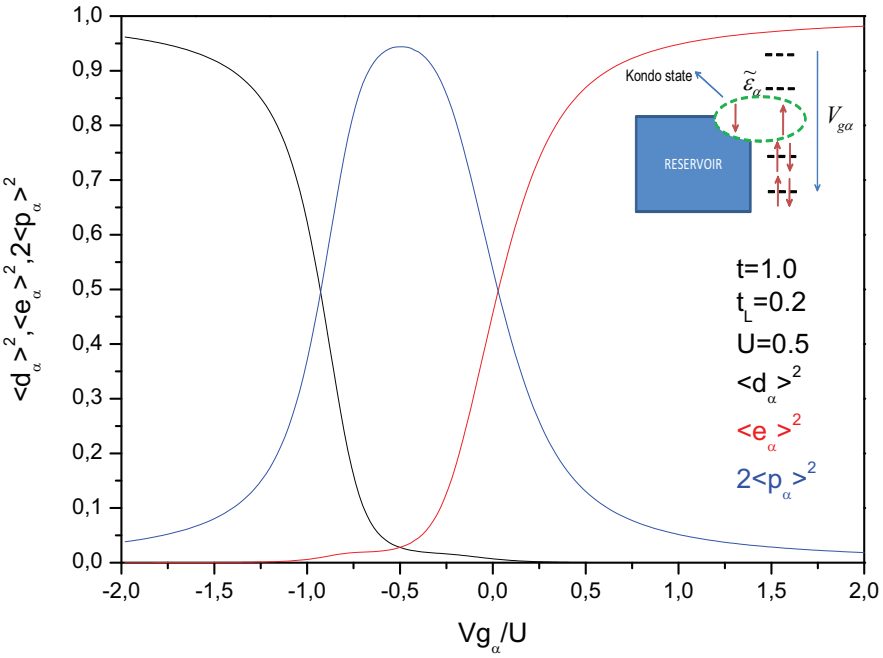

Figura 2.3: A figura mostra os valores médios dos operadores e_α, $p_{\alpha\sigma}$ e d_α em função do potencial de porta Vg_α aplicado na base do PQ.

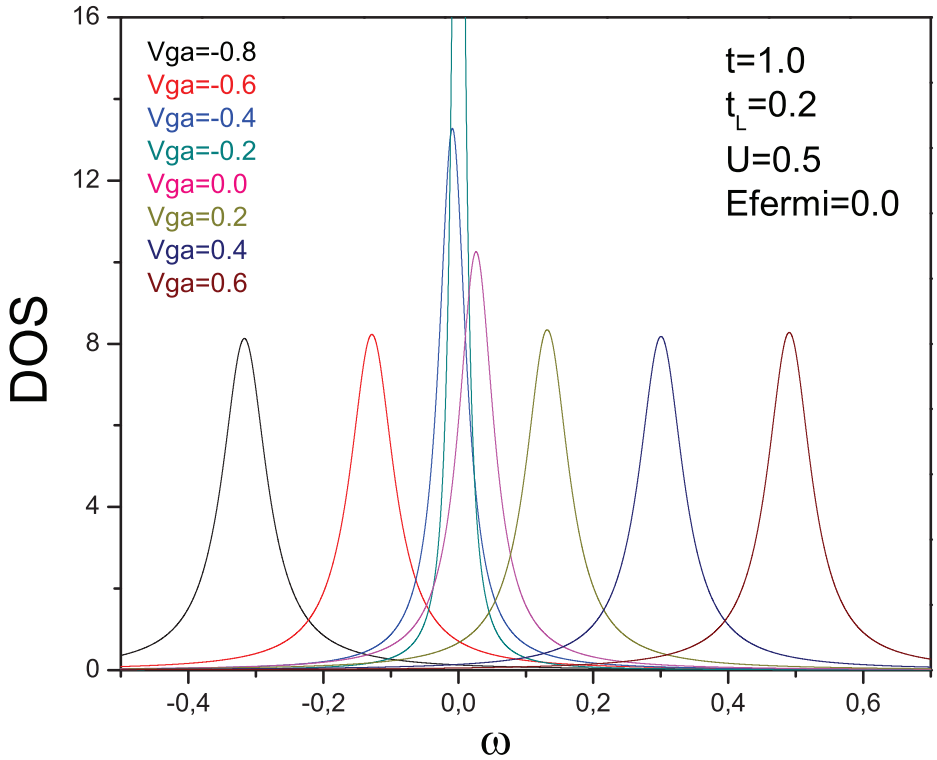

Figura 2.4: A figura mostra as DOS´s calculadas para alguns valores do potencial de porta aplicado na base do PQ . No resultado fica evidente a natureza Kondo do sistema com a persistência dessas curvas no nível de Fermi.

PUC-Rio - Certificação Digital Nº 0510943/CA

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

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

onde definimos as derivadas

$$\frac{\partial\bar{Z_{\alpha\sigma}}}{\partial\langle e_\alpha\rangle} = S_1S_2[\langle p_{\alpha\sigma}\rangle + S_2^2\langle e_\alpha\rangle(\langle e_\alpha\rangle\langle p_{\alpha\sigma}\rangle + \langle p_{\alpha\bar{\sigma}}\rangle)\langle d_\alpha\rangle] \quad (2\text{-}11)$$

$$\frac{\partial\bar{Z_{\alpha\sigma}}}{\partial\langle p_{\alpha\sigma}\rangle} = S_1S_2(\langle e_\alpha\rangle + \langle d_\alpha\rangle)[1 + (S_1^2 + S_2^2)\langle p_\alpha\rangle^2] \quad (2\text{-}12)$$

$$\frac{\partial\bar{Z_{\alpha\sigma}}}{\partial\langle d_\alpha\rangle} = S_1S_2[\langle p_{\alpha\sigma}\rangle + S_1^2\langle d_\alpha\rangle(\langle e_\alpha\rangle\langle p_{\alpha\sigma}\rangle + p_{\alpha\bar{\sigma}}\rangle\langle d_\alpha\rangle)], \quad (2\text{-}13)$$

com os termos

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

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

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,

PUC-Rio - Certificação Digital Nº 0510943/CA

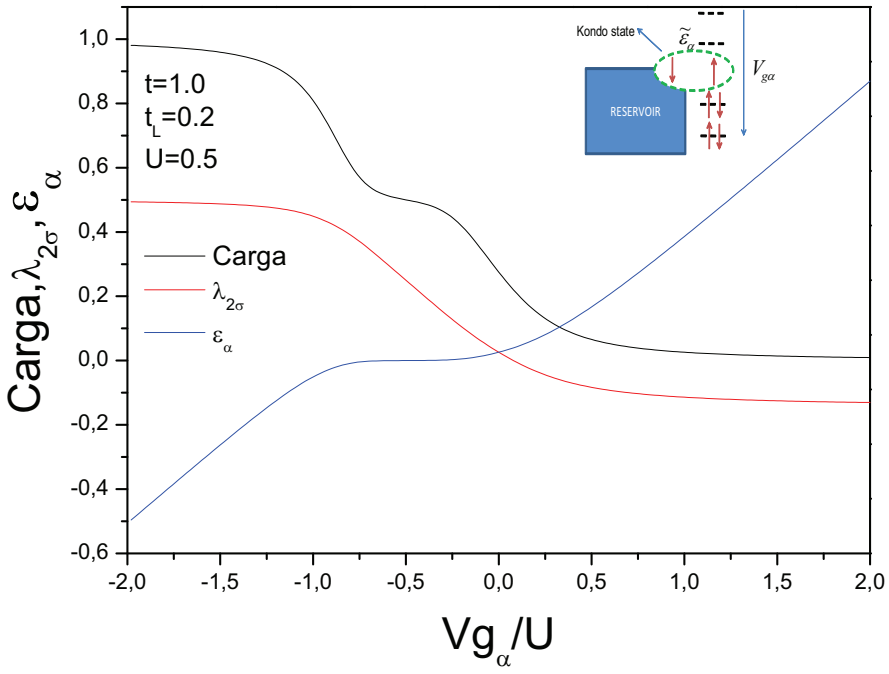

Figura 2.5: A figura mostra o comportamento do fator de renormalização $\lambda^{\alpha}_{2\sigma}$, do nível efetivo $\tilde{\epsilon_\alpha}$ e da ocupação eletrônica no PQ em função do potencial de porta V_α aplicado na base do PQ.

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 $\lambda^{\alpha}_{2\sigma}$ 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, consequentemente, 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^{α}_{1} e $\lambda^{\alpha}_{2\sigma}$ são obtidos

PUC-Rio - Certificação Digital Nº 0510943/CA

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

$$F = -TKln(Z), \tag{2-16}$$

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

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

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

$$F = -TKln\sum_i (e^{-\beta E_i(\lambda_i)}). \tag{2-18}$$

Minimizando esta energia em relação a λ_i temos

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

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

PUC-Rio - Certificação Digital Nº 0510943/CA

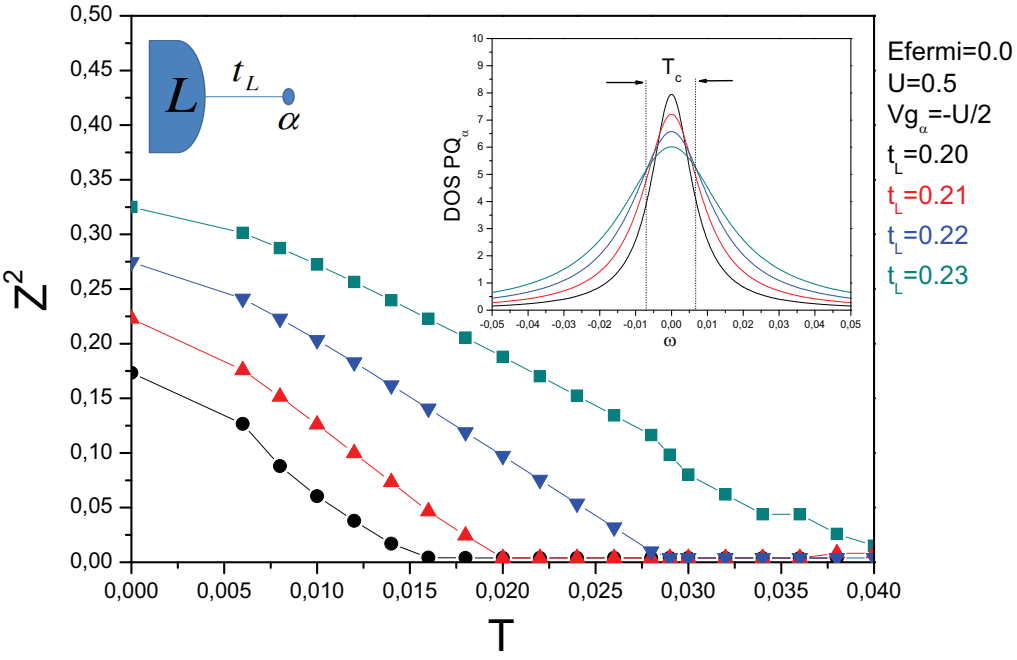

Figura 2.6: A figura mostra o comportamento do parâmetro Z^2 em função da temperatura e para quatro diferentes valores da conexão t_L entre o PQ e o contato metálico. Também mostra a DOS calculada no PQ em $T = 0$ para os valores de t_L que correspondem as curvas de Z^2. Para obtermos este resultado 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 $\lambda^\alpha_{2\sigma}$ e com a renormalização da conexão t_L através do parâmetro

PUC-Rio - Certificação Digital Nº 0510943/CA

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.

PUC-Rio - Certificação Digital Nº 0510943/CA