

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

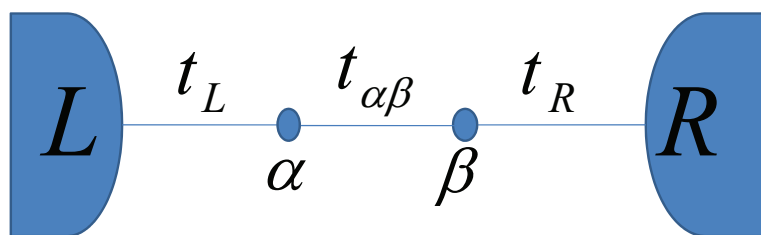


Figura 4.1: A figura mostra uma molécula artificial constituída por uma estrutura de dois PQ's conectados a dois reservatórios de elétrons.

de seus 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 reservatórios $L(R)$ 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_{NN}^{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

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

onde

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

Voltando com g_{N1} em 4-14 obtemos

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

¹ A 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

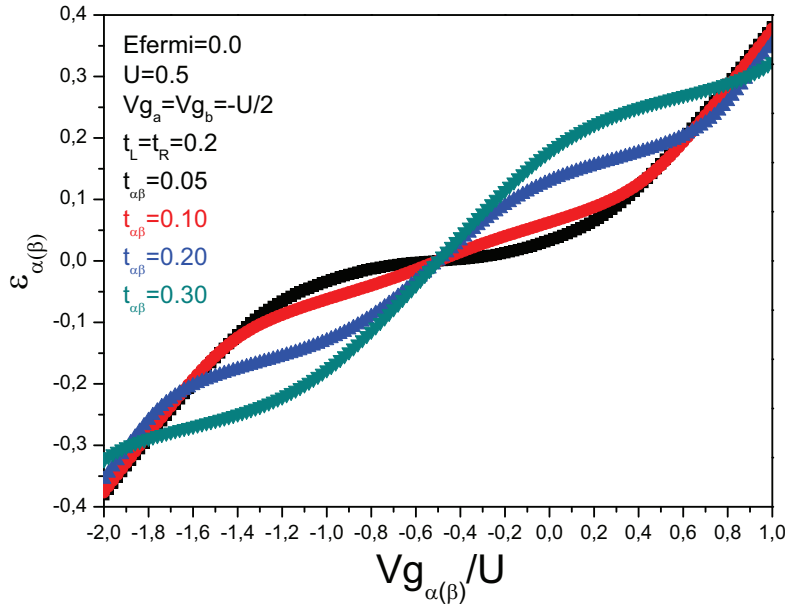


Figura 4.2: A figura mostra o comportamento do estado renormalizado $\tilde{\epsilon}_{\alpha(\beta)}$ dos PQ's interagentes em função do potencial de porta aplicado na base do PQ central para diferentes valores da conexão t_0 entre os PQ's.

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 singlete, 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

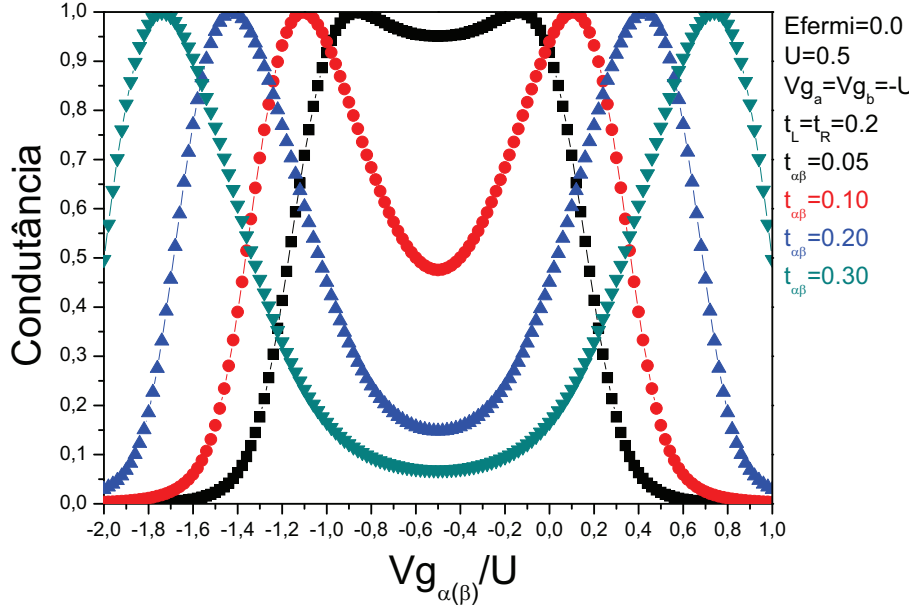


Figura 4.3: A figura mostra o comportamento da condutância em função do potencial de porta aplicado na base dos PQ's α e β para diferentes valores da conexão $t_{\alpha\beta}$ entre estes PQ's.

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

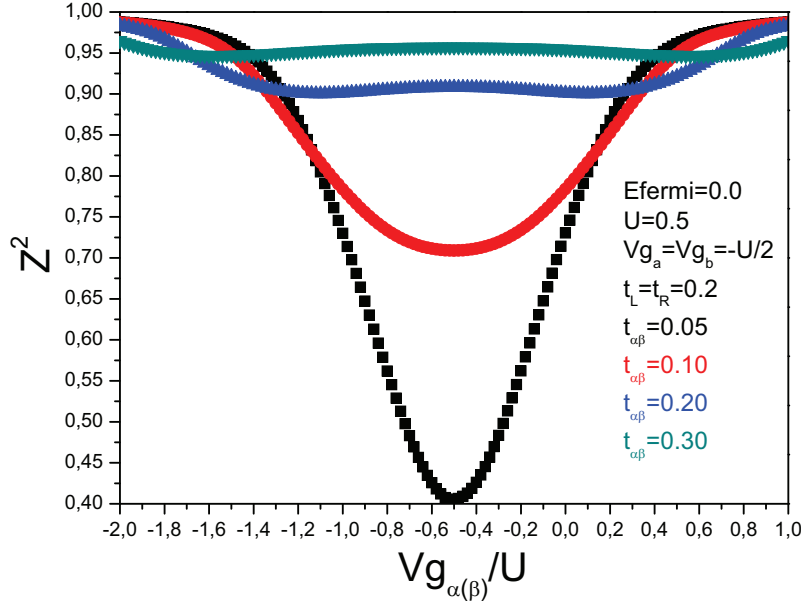


Figura 4.4: A figura mostra o comportamento do parâmetro Z^2 responsável por renormalizar as conexões com os reservatórios e entre os PQ's para diferentes valores da conexão $t_{\alpha\beta}$ entre os PQ's.

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

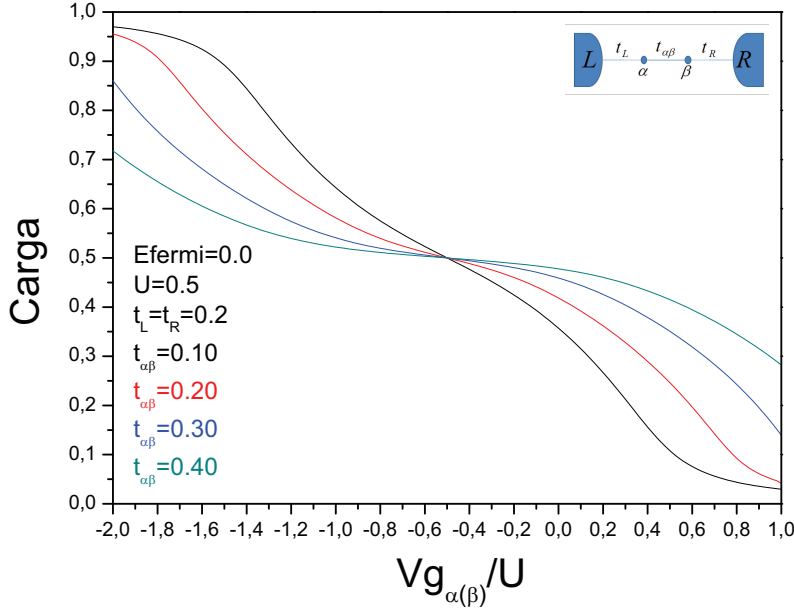


Figura 4.5: A figura mostra a carga por spin calculada no pq $\alpha(\beta)$ em função do potencial de porta $Vg_{\alpha(\beta)}$ aplicado na base desses PQ's para quatro diferentes conexões $t_{\alpha\beta}$.

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

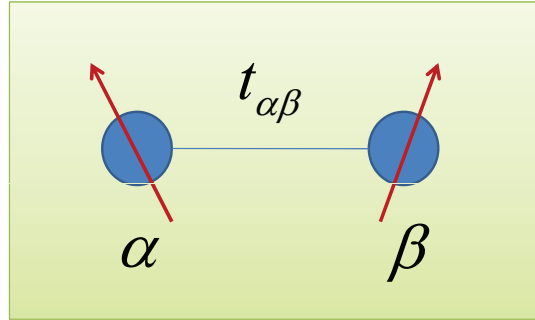


Figura 4.6: A figura mostra um sistema de dois PQ's com interação Coulombiana U e conectados entre si através $t_{\alpha\beta}$.

descrevem o regime Kondo molecular instalado no sistema.

Começamos por apresentar o Hamiltoniano

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

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

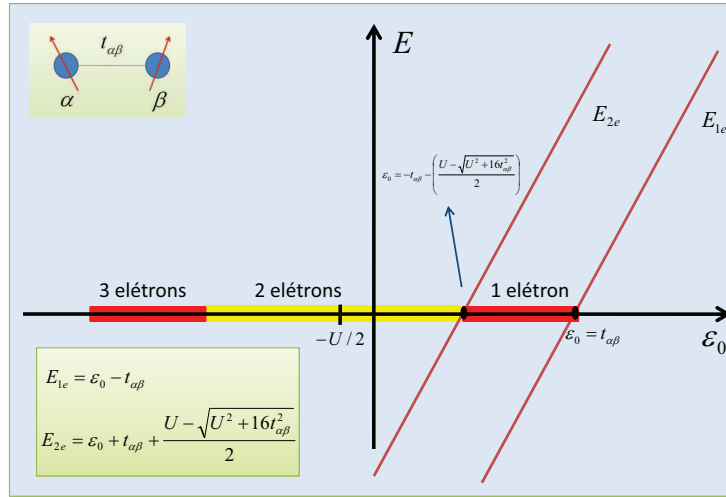


Figura 4.7: A figura mostra um perfil para a energia total do sistema em função do nível local ϵ_0 dos PQ's e destaca a existência de três regiões no espaço de ϵ_0 , que correspondem a valores de ϵ_0 para os quais o sistema se encontra ocupado com um, dois e três elétrons. Nas regiões em vermelho, de 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

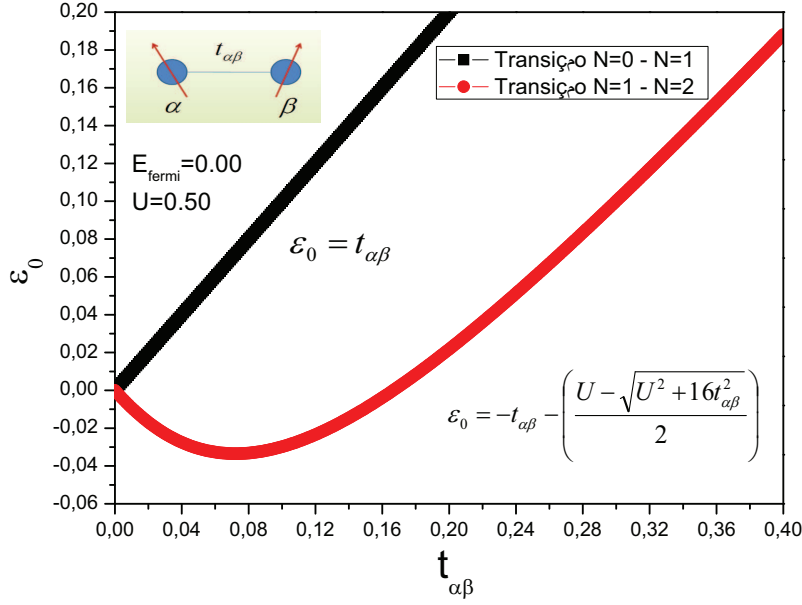


Figura 4.8: A figura mostra o comportamento das regiões de fronteira do regime Kondo molecular em função da conexão $t_{\alpha\beta}$ entre os PQ's. Estas regiões estão indicadas no diagrama da figura 4.7 e correspondem as bordas da região em vermelho destacada neste diagrama. No caso, a curva preta 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

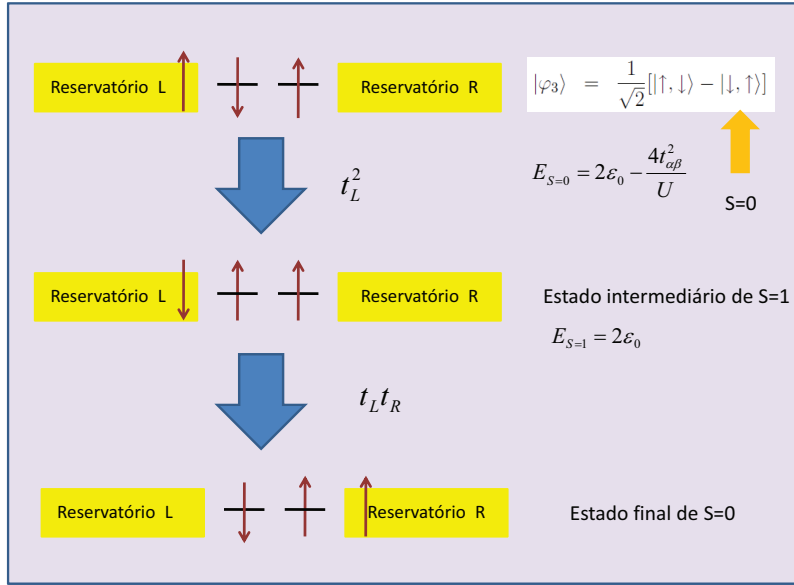


Figura 4.9: A figura mostra as transições características do regime Kondo de dois canais instalado no sistema de PQ's.

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

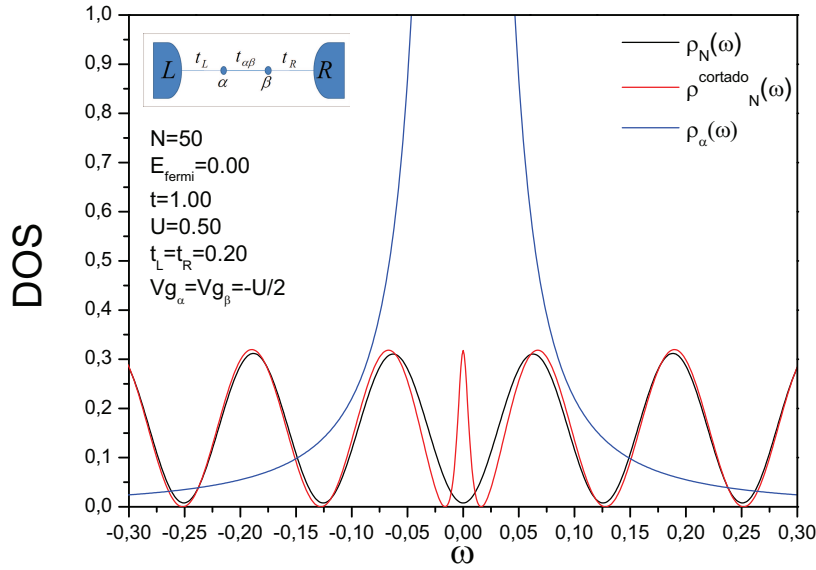


Figura 4.10: A figura mostra o efeito provocado pela presença da impureza $\alpha(\beta)$ na DOS calculada no interior do reservatório L(R). A curva preta mostra esta DOS para o sítio $N = 50$ no interior do reservatório isolado. A curva em vermelho mostra a DOS calculada neste sítio quando consideramos 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, $T \gg T_k$.

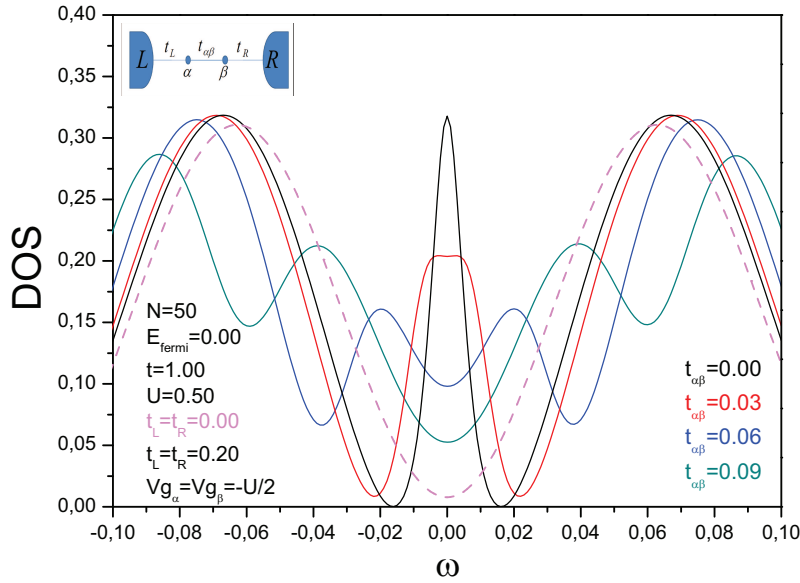


Figura 4.11: A figura mostra o efeito da interação anti-ferro entre os PQ's na DOS calculada no sítio $N = 50$ dentro dos reservatórios. A curva preta mostra a DOS calculada neste sítio para o caso em que $t_{\alpha\beta} = 0$. As curvas em vermelho, azul e cinza, são obtidas para $t_{\alpha\beta} =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

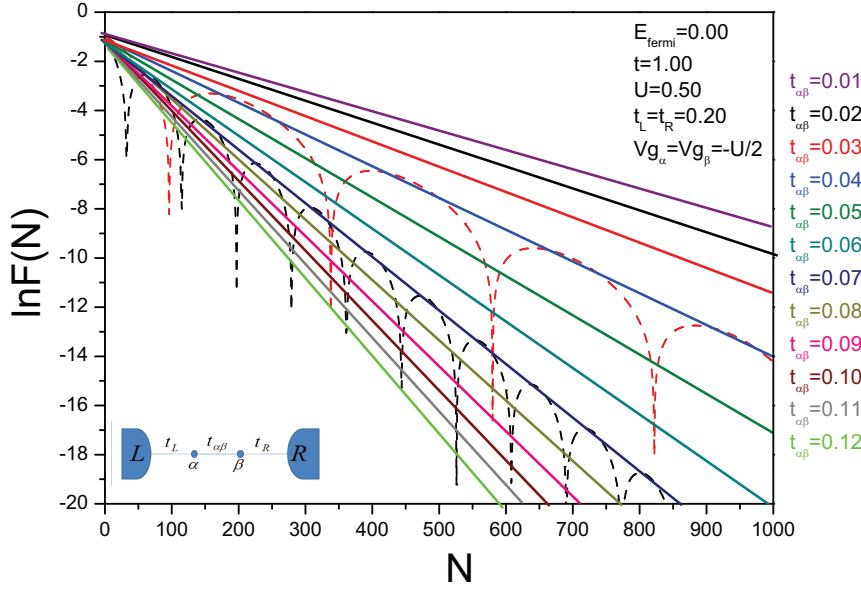


Figura 4.12: A figura mostra as retas que tangenciam a função $\ln F(N)$ para diferentes valores da conexão $t_{\alpha\beta}$ entre os PQ's. A inclinação dessas retas nos fornece a temperatura Kondo do sistema para estas conexões.

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

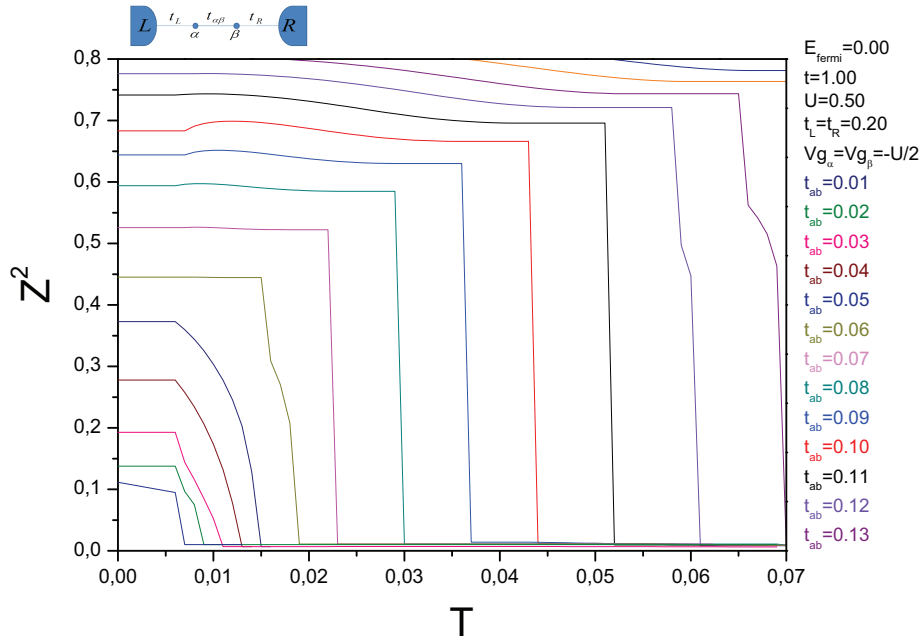


Figura 4.13: A figura mostra o comportamento do parâmetro de renormalização Z^2 em função da temperatura para o sistema de dois PQ's com diferentes valores da conexão $t_{\alpha\beta}$ entre os PQ's.

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

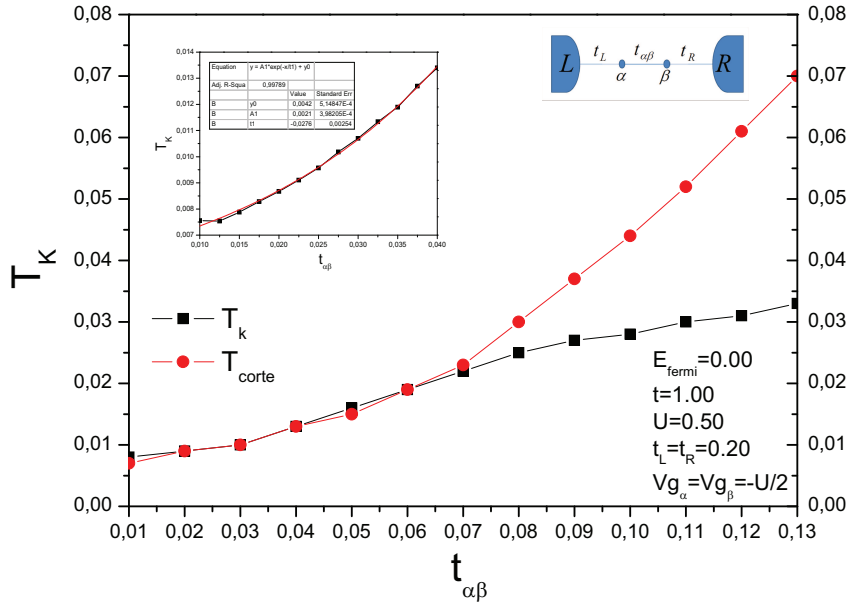


Figura 4.14: A figura mostra uma comparação entre a temperatura Kondo obtida a partir da inclinação das retas tangentes a $\ln F(N)$ e a temperatura T para a qual o parâmetro $Z^2 \rightarrow 0$ e o sistema é desacoplado dos reservatórios.

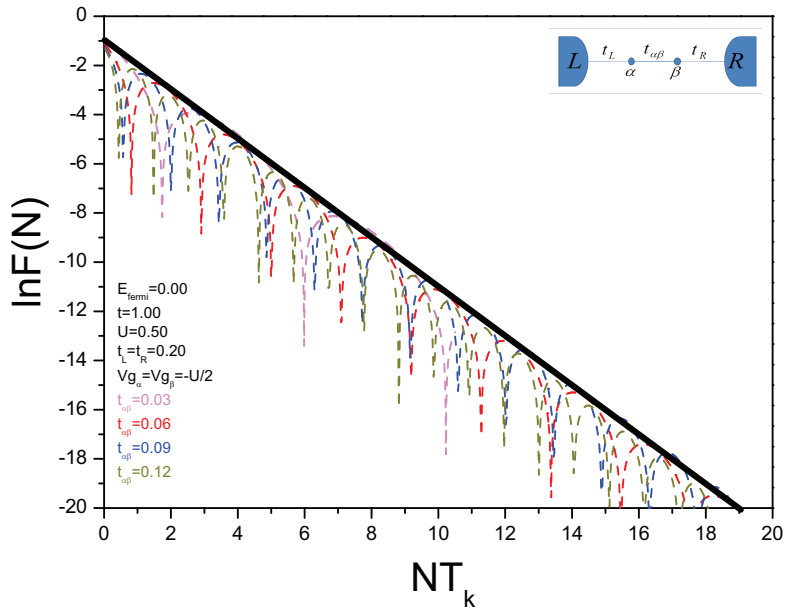


Figura 4.15: A figura mostra uma curva universal obtida para o logaritmo da função $F(N)$. Esta curva nos revela, de certa forma, o caráter universal da física do sistema associada ao efeito Kondo.

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 apresentando 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.