

5

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

5.1

Introdução

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

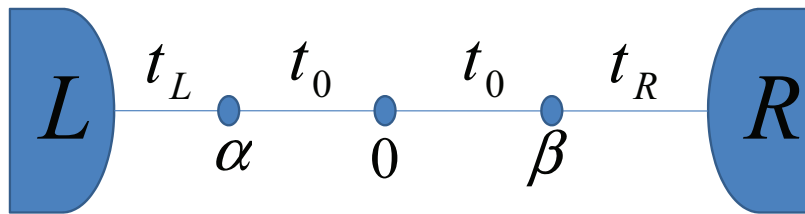


Figura 5.1: A figura mostra uma molécula artificial que consiste de dois PQ's, α e β , conectados a contatos metálicos e indiretamente ligados entre si através de suas respectivas conexões com um terceiro PQ 0.

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

5.2

Método dos bósons escravos

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

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

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

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

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

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

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

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

5.3

Funções de Green

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

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

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

e

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

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

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

e

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

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

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

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

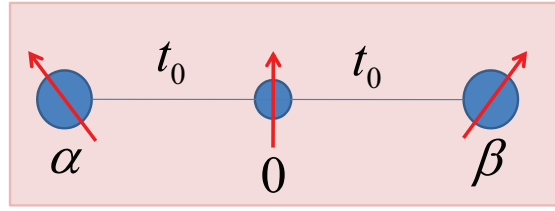


Figura 5.2: A figura mostra o sistema de três PQ's isolados com os PQ's interagentes α e β conectados em série ao PQ 0 não interagente.

5.4

Sistema de três PQ's (solução exata).

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

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

de porta V_{g_0} aplicado na base desse PQ. Em particular obtemos as soluções para $N = 2$ e $N = 3$ elétrons e investigamos a natureza dessas soluções no que se refere a orientação relativa entre os spins dos elétrons nos PQ's α e β . As soluções para o sistema com três e quatro elétrons, respectivamente, são idênticas a estas, por simetria.

O sistema desacoplado da figura 5.2 é descrito pelo Hamiltoniano

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

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

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

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

e anti-ferro

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

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

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

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

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

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

e

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

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

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

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

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

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

e anti-ferro

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

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

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

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

Escrevendo o Hamiltoniano nesta base separamos os blocos

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

e

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

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

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

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

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

onde, por sua vez,

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

Substituindo 5-24 em 5-23 obtemos a expressão

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

que, comparada com

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

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

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

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

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

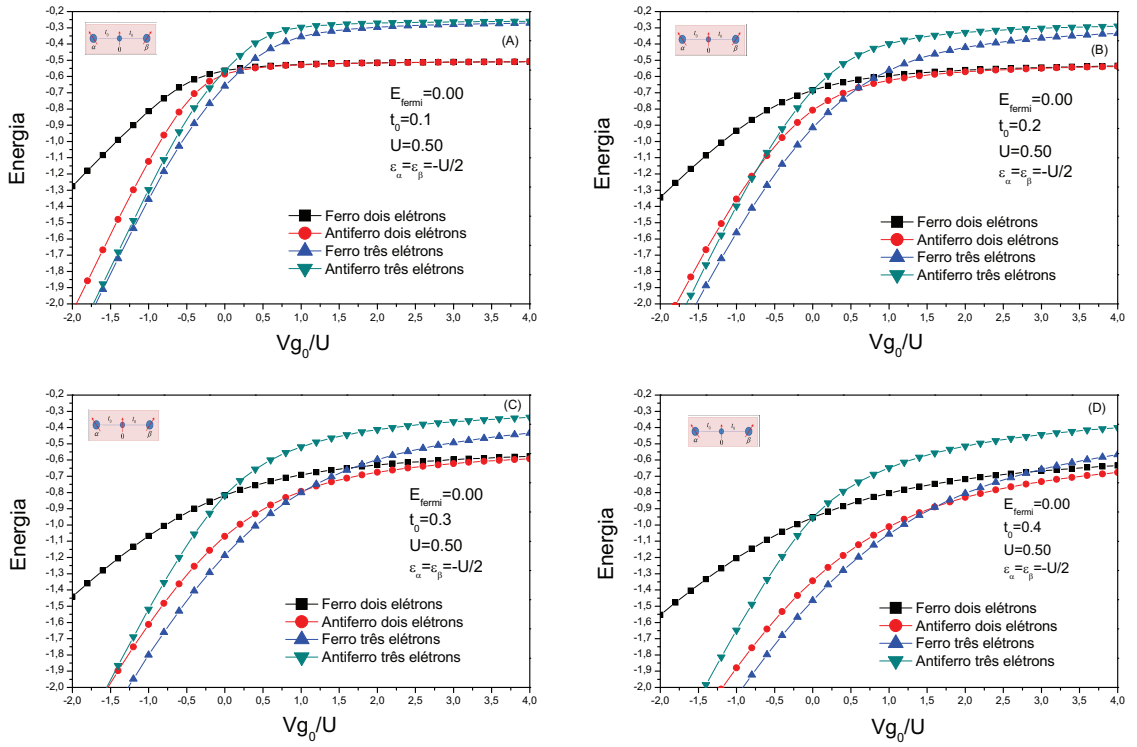


Figura 5.3: A figura mostra, para quatro diferentes valores de t_0 , as energias associadas as soluções ferro e anti-ferro que obtivemos de forma exata através da diagonalização do Hamiltoniano com duas e três partículas. Para este resultado o sistema foi preparado com o potencial de porta $Vg_{\alpha(\beta)}$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

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

5.5

Resultados

5.5.1

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

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

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

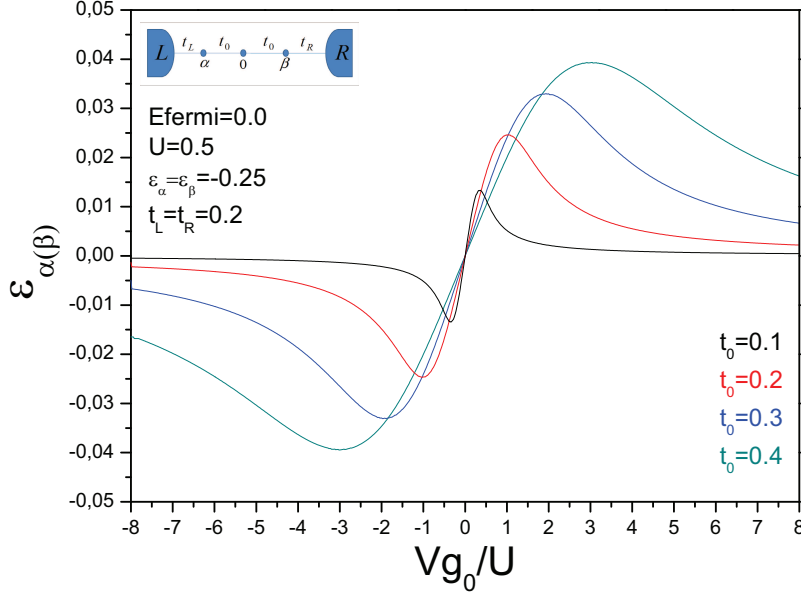


Figura 5.4: A figura mostra o comportamento do estado renormalizado $\tilde{\epsilon}_{\alpha(\beta)}$ dos PQ's interagentes em função do potencial de porta aplicado na base do PQ central para diferentes valores da conexão t_0 entre os PQ's. O sistema é considerado na posição de simetria partícula-buraco,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

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

O resultado obtido a partir do estado fundamental do aglomerado é mostrado na figura 5.5 e descreve para $t_0 = 0.1, 0.2$ e 0.3 a correlação de spin entre as diferentes componentes do sistema de PQ's que estamos considerando. Este resultado confirma a natureza ferro e antiferro da correlação de spin $\langle S_\alpha S_\beta \rangle$ entre PQ's interagentes para o sistema com três e dois elétrons, respectivamente (ver figura 5.7), e concorda qualitativamente com o nosso resultado no que se refere a região de transição entre estes dois regimes. Considerando, por exemplo, a curva azul, obtida para $t_0 = 0.3$, observamos que

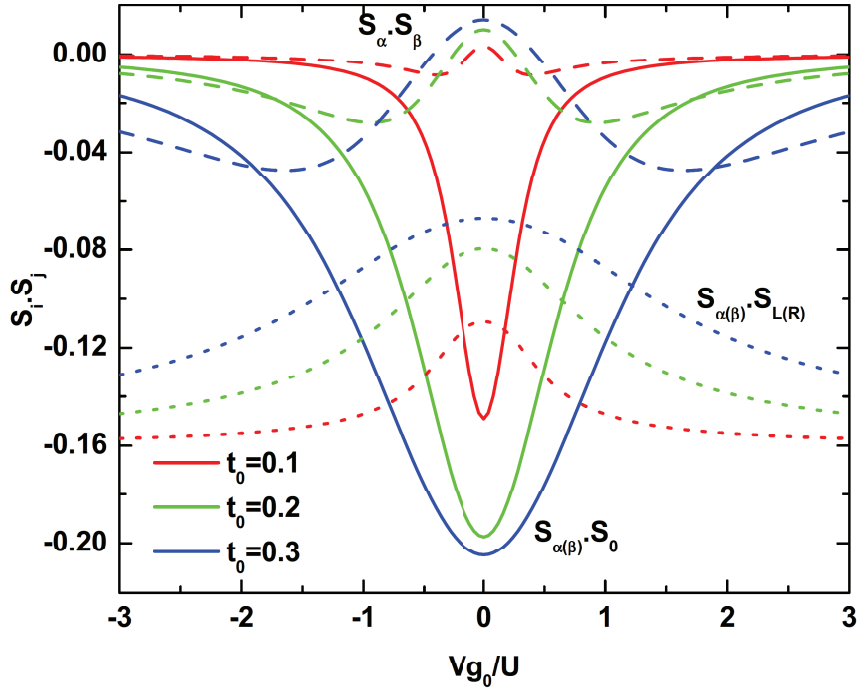


Figura 5.5: A figura mostra a correlação de spin entre as diferentes partes do sistema de três PQ's que estamos tratando neste capítulo.

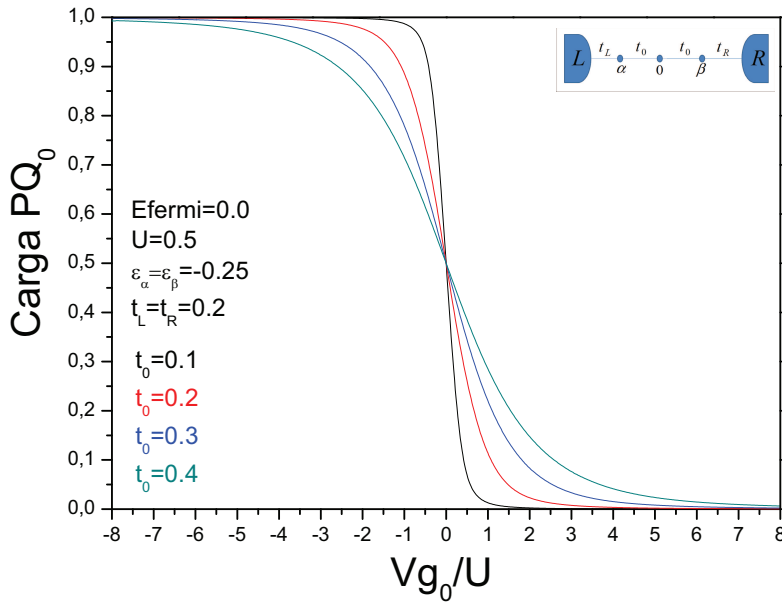


Figura 5.6: A figura mostra o estado de carga do PQ central calculado em função do potencial de porta aplicado na base desse PQ e para diferentes valores da conexão t_0 entre os PQ's. O sistema é considerado na posição de simetria partícula-buraco, com $\epsilon_{\alpha(\beta)} = -U/2$.

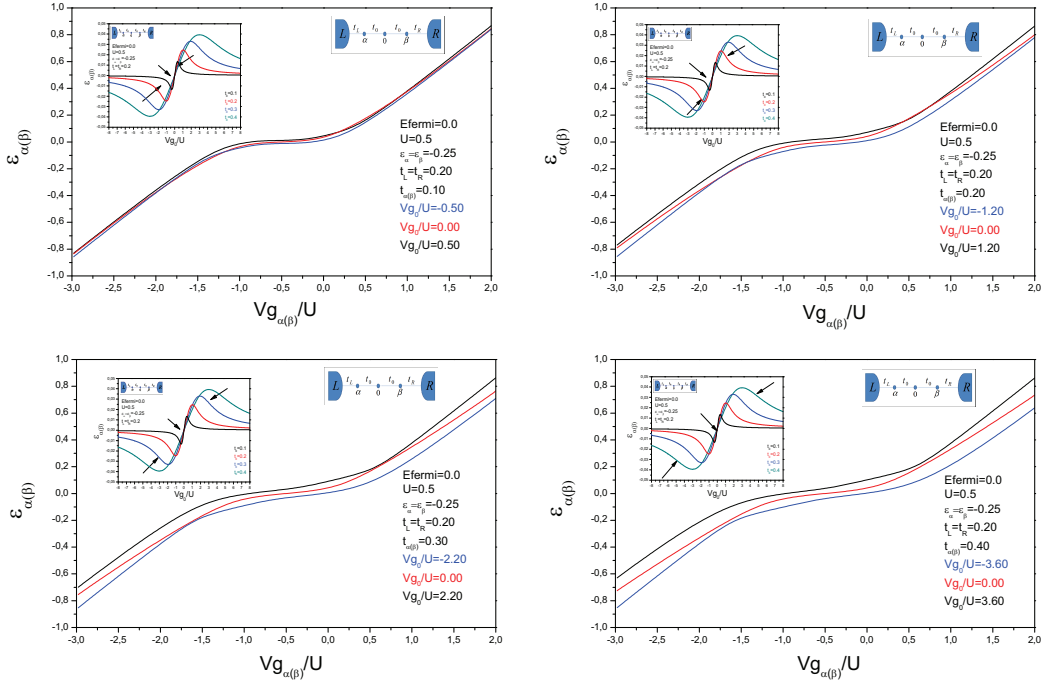


Figura 5.7: A figura mostra o comportamento do estado renormalizado $\epsilon_{\alpha(\beta)}$ em função do potencial de porta $Vg_{\alpha(\beta)}$ no PQ $\alpha(\beta)$ para o sistema com o nível de energia ϵ_0 do PQ central ajustado em três diferentes posições. Cada quadrante corresponde a um valor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

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

afasta do nível de Fermi. Essa propriedade é observada no gráfico da figura 5.5 pelo comportamento das linhas tracejadas que se aproximam de zero com o aumento em módulo do potencial de porta V_{g_0} aplicado na base do PQ central.

Na figura 5.6 apresentamos um resultado que mostra a carga por spin que entra no sistema através do PQ central em função do potencial de porta V_{g_0} aplicado na base desse PQ para $t_0 = 0.1, 0.2, 0.3$ e 0.4 . Com $V_{g_{\alpha(\beta)}}$ ajustado em $-U/2$ os PQ's laterais já estão ocupados com um elétron cada e as curvas mostradas na figura descrevem a transição do estado de ocupação do sistema entre dois e quatro elétrons. Observamos nesse resultado que essa transição ocorre de forma mais abrupta para valores menores da conexão t_0 com o PQ central e que a passagem de $N = 2 \rightarrow N = 3$ e de $N = 3 \rightarrow N = 4$ elétrons concorda com os resultados que obtivemos através da solução exata e do estado renormalizado $\tilde{\epsilon}_{\alpha(\beta)}$ que apresentamos na figura 5.4 se adotarmos como critério que essas transições ocorrem, respectivamente, em 0.25 e 0.75 no eixo das ordenadas do gráfico da carga. Tomando a curva cinza como exemplo, observamos esses pontos em $V_{g_0}/U = 1.6$ e $V_{g_0}/U = -1.6$, que correspondem aos limites da região em que $\tilde{\epsilon}_{\alpha(\beta)}$ apresenta um comportamento aproximadamente linear em função de V_{g_0} , no resultado da figura 5.4, e caracterizam, respectivamente, o início da região de transição para os regimes anti-ferro de dois e de quatro elétrons no sistema de PQ's.

É conveniente estudar a instalação do regime Kondo no sistema de três PQ's e investigar a possível compatibilidade deste regime com a natureza ferro e anti-ferro da correlação $\langle S_\alpha S_\beta \rangle$ nas regiões de três e dois elétrons, respectivamente. Para isso consideramos os quatro valores de t_0 utilizados no resultado da figura 5.4 e, para cada um desses valores, ajustamos o potencial de porta V_{g_0} em três diferentes posições, que correspondem ao sistema ocupado com dois, três e quatro elétrons. Na região de três elétrons ajustamos este potencial em $V_{g_0} = 0$ para os quatro valores de t_0 considerados enquanto que nas regiões de dois e quatro elétrons, para cada conexão t_0 , adotamos de forma arbitrária valores de V_{g_0} próximos as regiões onde $\tilde{\epsilon}_{\alpha(\beta)}$ é máximo e mínimo, respectivamente. Com V_{g_0} fixo calculamos o estado renormalizado $\tilde{\epsilon}_{\alpha(\beta)}$ em função do potencial de porta $V_{g_{\alpha(\beta)}}$ aplicado nos PQ's interagentes.

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

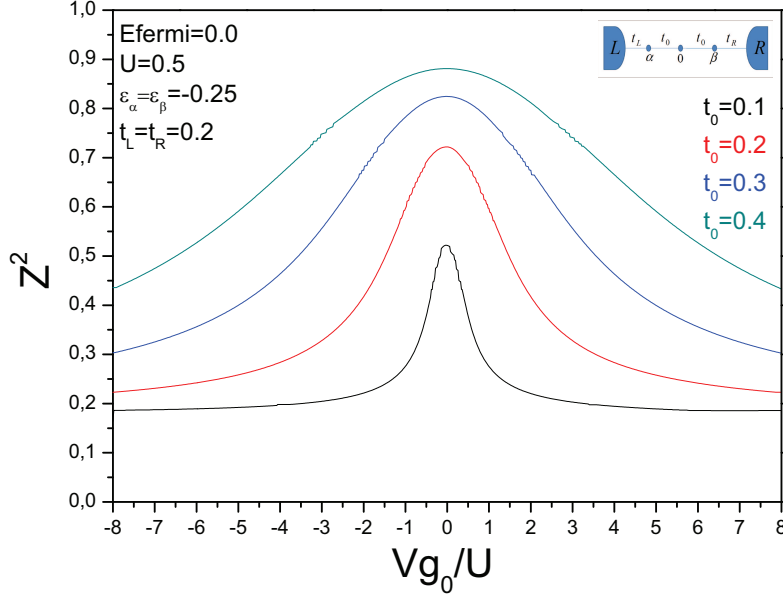


Figura 5.8: A figura mostra o comportamento do parâmetro Z^2 em função do potencial de porta Vg_0 aplicado na base do PQ central para diferentes valores da conexão t_0 entre os PQ's. O sistema é considerado na posição de simetria partícula-buraco, com $\epsilon_{\alpha(\beta)} = -U/2$.

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

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

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

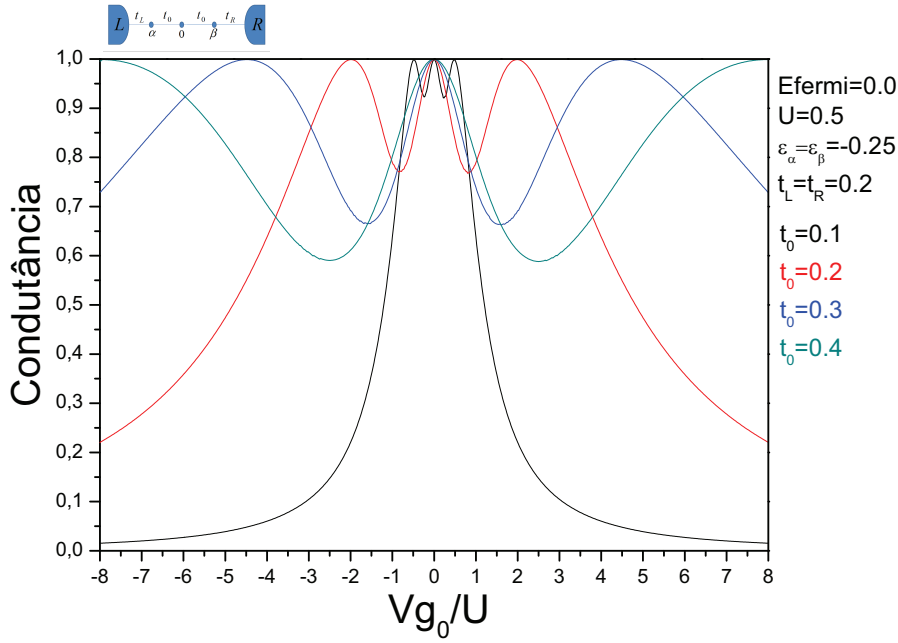


Figura 5.9: A figura mostra o comportamento da condutância em função do potencial de porta aplicado na base do PQ central para diferentes valores da conexão t_0 entre os PQ's. O sistema é considerado na posição de simetria partícula-buraco, com $\epsilon_{\alpha(\beta)} = -U/2$.

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

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

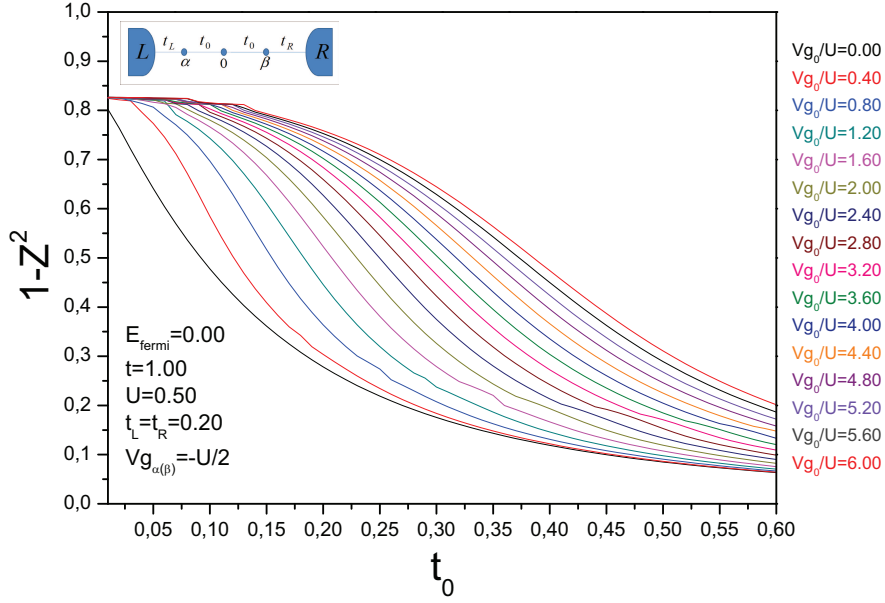


Figura 5.10: A figura mostra o comportamento do parâmetro $1 - Z^2$ em função da conexão t_0 para diferentes posições do nível local ϵ_0 do PQ central. Para este resultado os níveis de energia dos PQ's laterais são colocados em $\epsilon_{\alpha(\beta)} = -U/2$.

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

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

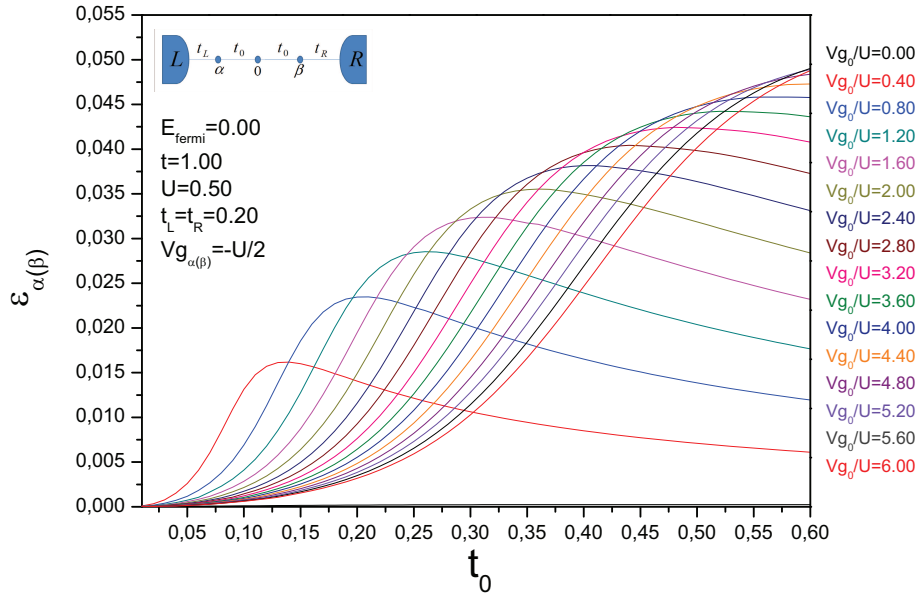


Figura 5.11: A figura mostra o comportamento dos níveis renormalizados $\tilde{\epsilon}_{\alpha(\beta)}$ dos PQ's laterais em função da conexão t_0 para diferentes posições do nível local ϵ_0 do PQ central. Para este resultado os níveis de energia dos PQ's laterais são colocados em $\epsilon_{\alpha(\beta)}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

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

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

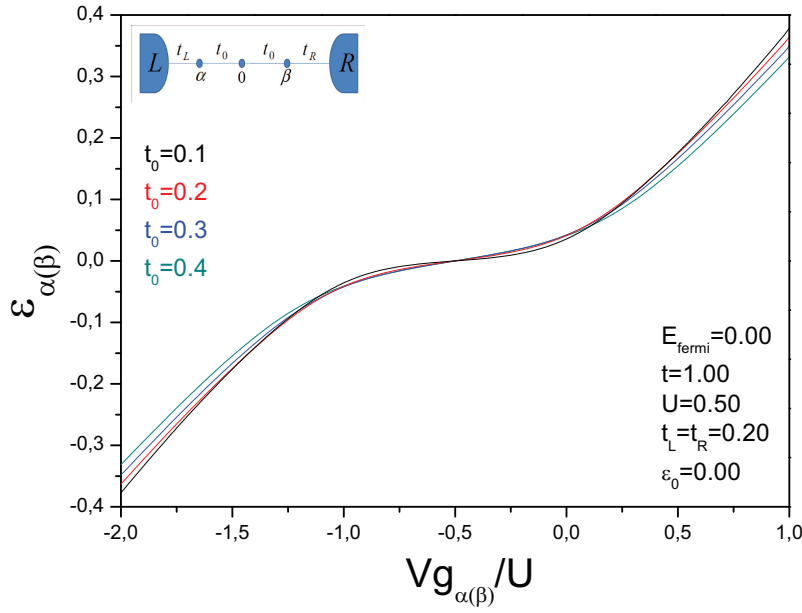


Figura 5.12: A figura mostra o comportamento do estado renormalizado $\tilde{\epsilon}_{\alpha(\beta)}$ dos PQ's interagentes em função do potencial de porta aplicado na base destes PQ's e para diferentes valores da conexão t_0 . O nível de energia do PQ central é colocado em zero e, como podemos observar,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

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

5.5.2

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

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

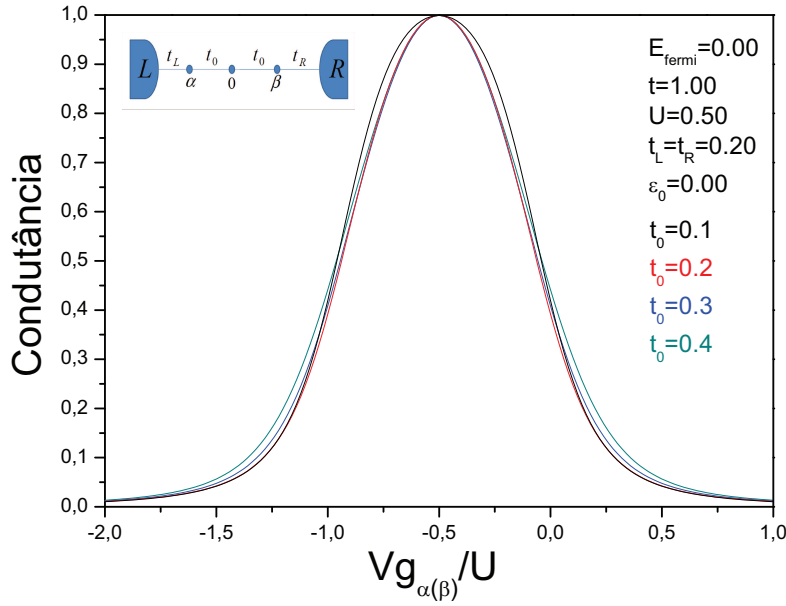


Figura 5.13: A figura mostra a condutância em função do potencial de porta aplicado na base dos PQ's interagentes $\alpha(\beta)$ e para diferentes valores da conexão t_0 . O nível de energia do PQ central é colocado em zero e, como podemos observar, o sistema apresenta simetria partícula buraco em torno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

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

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

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

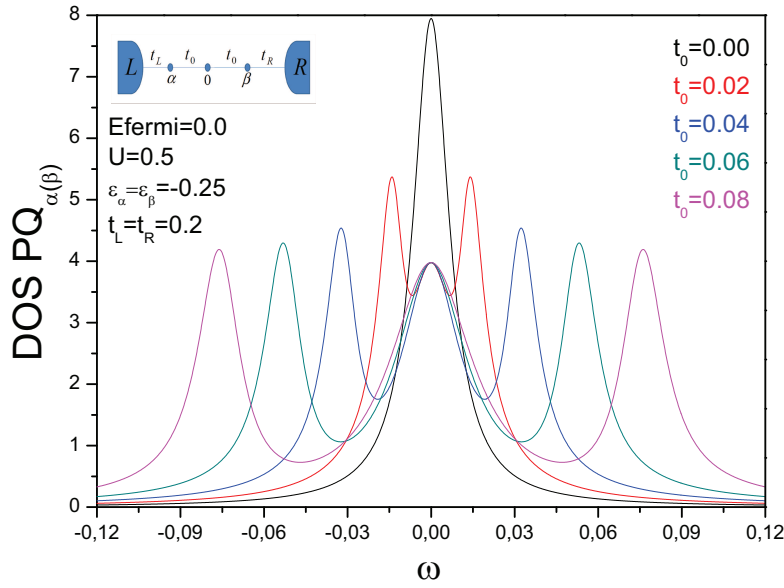


Figura 5.14: A figura mostra o comportamento da DOS local nos PQ's interagentes α e β com o aumento na magnitude da conexão t_0 com o PQ central 0. Para este resultado os níveis de energia dos PQ's laterais são colocados em $\epsilon_{\alpha(\beta)} = -U/2$.

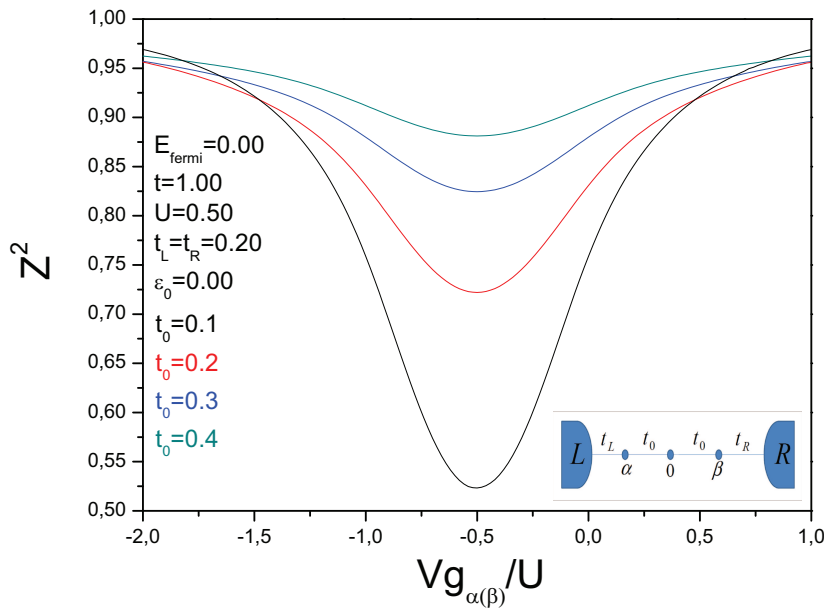


Figura 5.15: A figura mostra o comportamento do parâmetro Z^2 em função do potencial de porta aplicado na base dos PQ's interagentes $\alpha(\beta)$ e para diferentes valores da conexão t_0 . O nível de energia do PQ central é colocado em zero e, como podemos observar, o sistema apresenta simetria partícula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

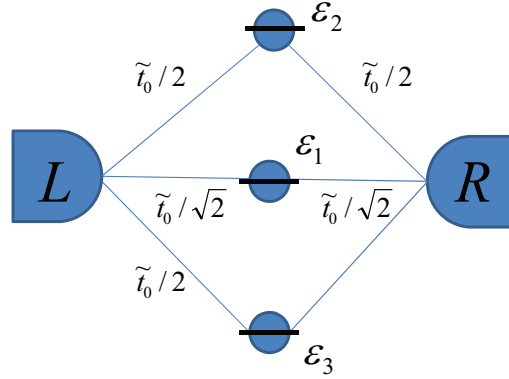


Figura 5.16: A figura mostra os níveis de energia associados aos estados Φ_1 , Φ_2 e Φ_3 que constituem a base que renormaliza o sistema de três PQ's.

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

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

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

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

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

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

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

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

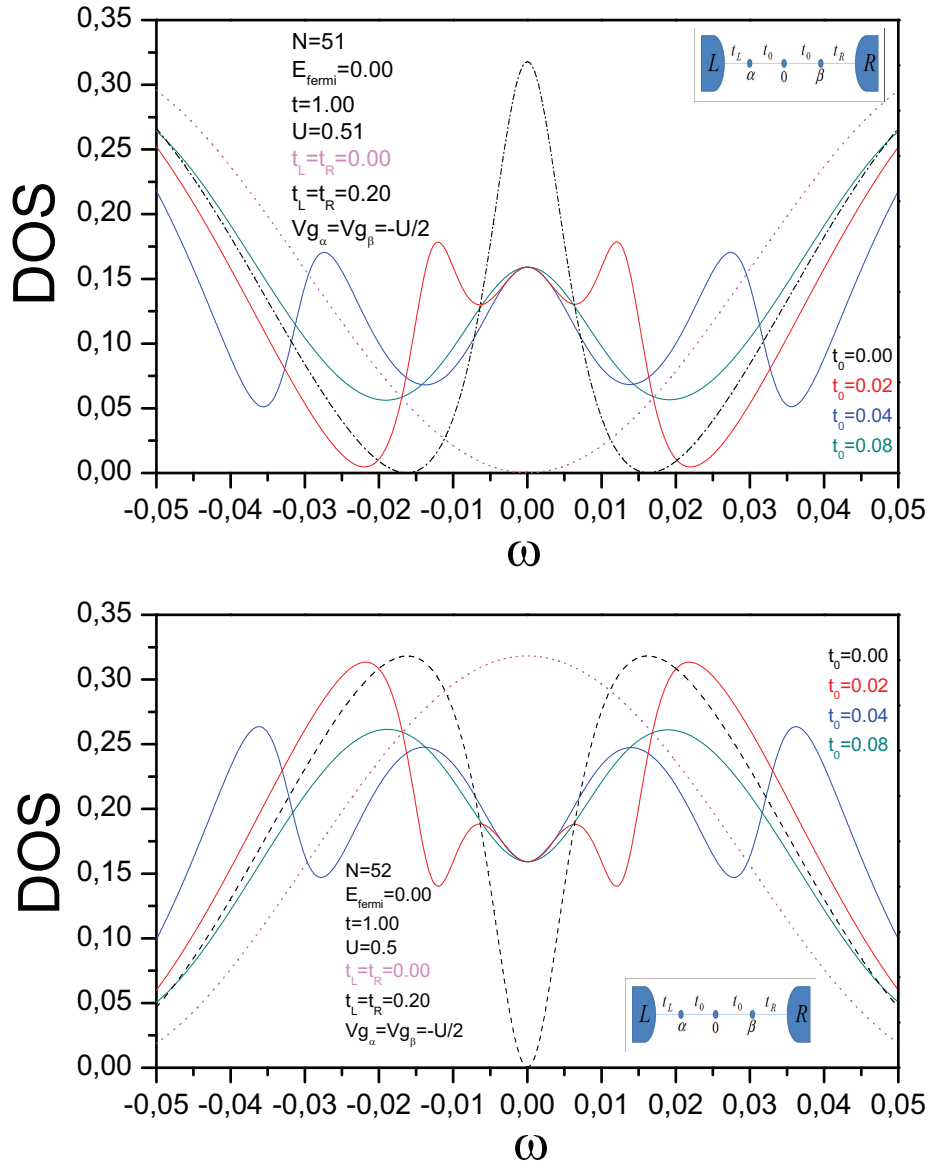


Figura 5.17: A figura mostra o efeito provocado na DOS dos sítios $N = 51$ e $N = 52$ dentro dos reservatórios pelo processo de formação do estado ferromagnético com o aumento na magnitude da conexão t_0 entre os PQ's. Os dois gráficos mostram a ressonância e a anti-ressonância observada na DOS próxima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

5.5.3

A Nuvem e a temperatura Kondo

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

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

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

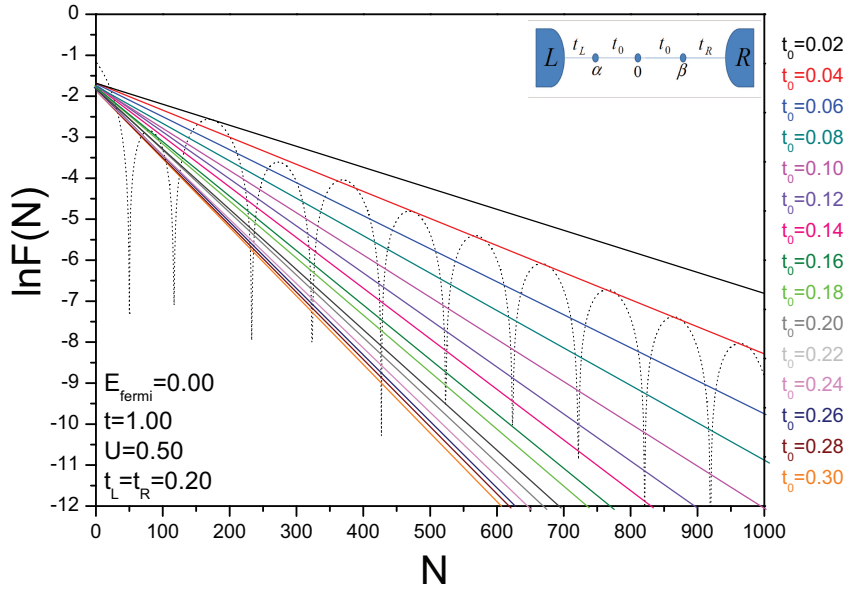


Figura 5.18: A figura mostra as retas tangentes as curvas de $\ln F(N)$ no limite assintótico para diferentes valores da conexão t_0 com o PQ central. Este resultado foi obtido para o sistema na posição de simetria partícula-buraco, com $\epsilon_{\alpha(\beta)} = -U/2$ nos PQ's laterais e $\epsilon_0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

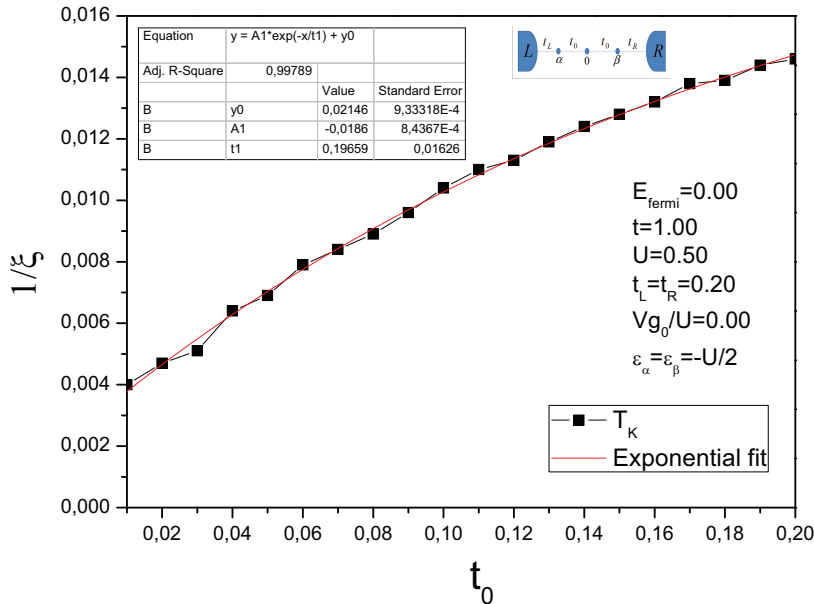


Figura 5.19: A figura mostra o inverso da extensão ξ_i da nuvem Kondo em função da conexão t_0 entre os PQ's. Este resultado foi obtido para o sistema na posição de simetria partícula-buraco, com $\epsilon_{\alpha(\beta)} = -U/2$ nos PQ's laterais e $\epsilon_0 = 0$ no PQ central.

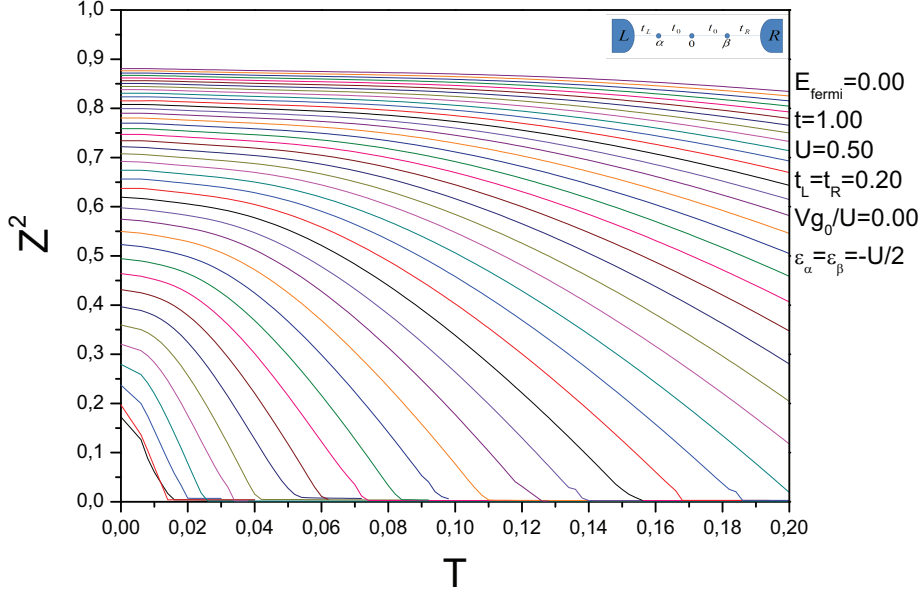


Figura 5.20: A figura mostra o comportamento do parâmetro Z^2 em função da temperatura T para $t_0 = 0.01; 0.02; 0.03; \dots; 0.30$ entre os PQ's. Este resultado foi obtido para o sistema na posição de simetria partícula buraco, com $\epsilon_{\alpha(\beta)} = -U/2$ nos PQ's laterais e $\epsilon_0 =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

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

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

5.6

Conclusões

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

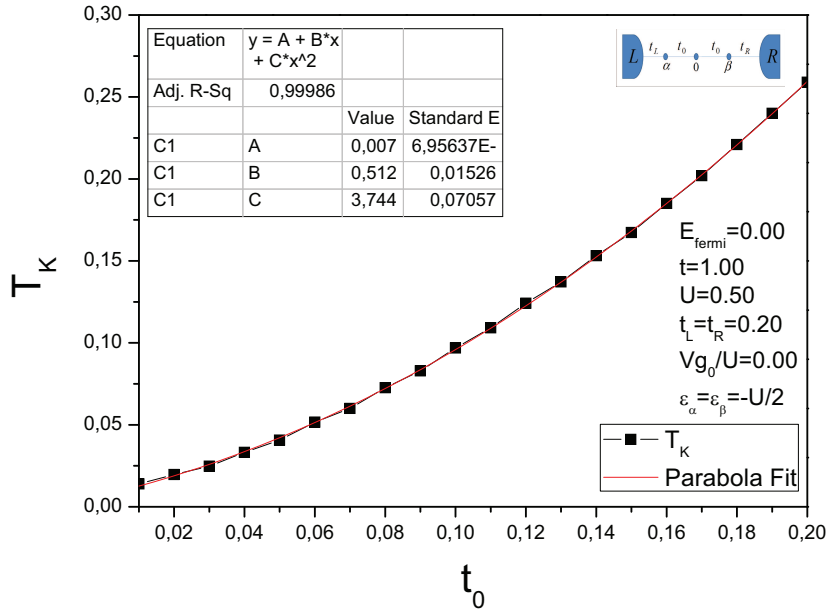


Figura 5.21: A figura mostra a temperatura Kondo T_k do sistema em função da conexão t_0 entre os PQ's. Este resultado foi obtido para o sistema na posição de simetria partícula-buraco, com $\tilde{\epsilon}_{\alpha(\beta)} = -U/2$ nos PQ's laterais e $\epsilon_0 = 0$ no PQ central.

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