

4

Efeito Kondo em pontos quânticos

Nesse capítulo vamos nos dedicar ao estudo do efeito Kondo em PQ's. Trataremos primeiramente um sistema de um único PQ acoplado a reservatórios metálicos no regime de forte interação coulombiana, onde aplicaremos o método dos bosons escravos para U infinito e o método dos operadores de projeção Hubbard, e faremos uma discussão dos dois métodos. Estudaremos também o sistema constituído de dois pontos quânticos arranjados em série e em paralelo entre dois reservatórios eletrônicos. Aplicaremos o método dos bósons escravos para U finito para estudar o transporte eletrônico através do sistema. Como introdução ao método dos bosons escravos para U finito vamos discutí-lo no contexto de uma única impureza.

4.1

Ponto quântico simples – U infinito

Nesta seção vamos tratar do efeito Kondo em uma impureza simples acoplada a um reservatório de elétrons livres. Embora este assunto tenha sido estudado extensivamente nos últimos anos, vamos tratá-lo aqui, a fim de aplicar um pouco da teoria que temos utilizado no caso da interação elétron-fônon. O sistema no qual vamos nos concentrar aqui é constituído por um PQ colocado em contato com um reservatório de elétrons livres. Vamos considerar um PQ muito pequeno tal que o espaçamento entre os níveis de energia seja muito grande devido ao forte confinamento, de modo que podemos considerar apenas um desses níveis. Tipicamente o tamanho de um ponto quântico varia de 100 a 500 nanômetros e o espaçamento típico é de aproximadamente 30 meV[84]. Devido ao forte confinamento, a interação coulombiana U na dupla ocupação desse nível é muito forte de tal modo que podemos considerá-la como sendo infinita ($U = \infty$). Para tratar desse problema vamos utilizar o método dos bosons escravos para U infinito, introduzido por Coleman[85]. É sabido que ele é capaz de capturar a física do efeito Kondo para este sistema. A idéia inicial foi tentar explorar a semelhança existente entre o Hamiltoniano para este sistema escrito em termos dos bosons escravos e o Hamiltoniano que descreve

o problema da interação elétron-fônon no capítulo anterior.

4.1.1

O Hamiltoniano bosonizado

A idéia principal na utilização dos bosons escravos para U infinito, foi inicialmente introduzida por Newns e Read. Ela consiste em introduzir operadores auxiliares aos operadores fermiônicos e tratá-los de maneira que as informações importantes sobre a física envolvida no efeito Kondo estejam de certa forma levadas em conta através deles.

Seja um sistema composto por uma impureza acoplada a um reservatório de elétrons livres. Considerando um único nível, os estados da impureza são: $|0\rangle$, $|\uparrow\rangle$, $|\downarrow\rangle$ e $|\uparrow\downarrow\rangle$. Obviamente esses não podem ser auto-estados do sistema, uma vez que esses estados devem hibridizar-se com estados dos elétrons livres, por estarem em contato com o reservatório. No limite em que $U = \infty$, o estado duplamente ocupado está proibido, uma vez que é necessário uma energia infinita para que a impureza esteja duplamente ocupada. Portanto, é conveniente introduzir novos operadores bosônicos no Hamiltoniano do sistema que garantam que a impureza nunca será duplamente ocupada, eliminando o estado duplamente ocupado do espaço de Hilbert. A introdução desses novos operadores, chamados de “bosons escravos”, consiste em fazer as substituições

$$c_{d\sigma}|\sigma\rangle \rightarrow b^\dagger c_{d\sigma}|\sigma\rangle \quad (4.1)$$

$$c_{d\sigma}^\dagger|0\rangle \rightarrow c_{d\sigma}^\dagger b|vac\rangle \quad (4.2)$$

Os operadores bosônicos $b^\dagger$ e b podem ser vistos como operadores que criam e aniquilam um estado do vazio, respectivamente. Sobre esse estado criado por $b^\dagger$ atua o operador fermiônico, criando nele um quase-elétron, uma vez que esse férmion agora interage com um outro que eventualmente “tenta” entrar na impureza, onde $|vac\rangle$ denota o vácuo. Apenas as substituições acima não são suficientes para eliminar a dupla ocupação, pois em princípio podemos atuar consecutivamente os produtos $c_{d\uparrow}^\dagger b^\dagger$ e $c_{d\downarrow}^\dagger b^\dagger$ sobre o vácuo, e criar um estado duplamente ocupado. Introduz-se então a restrição:

$$b^\dagger b + c_{d\uparrow}^\dagger c_{d\uparrow} + c_{d\downarrow}^\dagger c_{d\downarrow} = 1. \quad (4.3)$$

A expressão acima estabelece uma condição de vínculo de forma que se a impureza estiver vazia $\sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} c_{d\sigma}^\dagger c_{d\sigma} = 0$ então $b^\dagger b = 1$ e se $\sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} c_{d\sigma}^\dagger c_{d\sigma} = 1$ então $b^\dagger b = 0$. Isso deixa claro que operador bosônico $b^\dagger b$ denota o número

de estados vazios, que podem ser, obviamente, somente 0 ou 1. Ademais, sendo também 0 ou 1 os possíveis valores de $\sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} c_{d\sigma}^\dagger c_{d\sigma}$ está garantida a exclusão do estado duplamente ocupado do espaço de Hilbert. A restrição 4.3 imposta sobre os bosons explicam a razão pela qual eles são chamados de escravos. Esse vínculo é introduzido no Hamiltoniano do sistema por meio de um multiplicador de Lagrange. O Hamiltoniano então pode ser escrito como [85],

$$H = \sum_{\sigma} \tilde{\epsilon}_d c_{d\sigma}^\dagger c_{d\sigma} + \sum_{k\sigma} \epsilon_{k\sigma} c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma} + V \sum_{k\sigma} \left[c_{k\sigma}^\dagger c_{d\sigma} b^\dagger + c_{d\sigma}^\dagger c_{k\sigma} b \right] + \lambda [b^\dagger b - 1], \quad (4.4)$$

onde $c_{d\sigma}^\dagger (c_{d\sigma})$ cria(aniquila) um quase-elétron na impureza, $c_{k\sigma}^\dagger (c_{k\sigma})$ cria(aniquila) um elétron livre no reservatório e $\tilde{\epsilon}_d = \epsilon_d + \lambda$ é a energia do estado localizado, renormalizada pelo multiplicador de Lagrange λ . Finalmente, V é a constante de acoplamento entre os elétrons na impureza e os elétrons livres. A aproximação de campo médio para os bosons escravos consiste em tomar os operadores $b^\dagger$ e b por seus respectivos valores esperados $\langle b^\dagger \rangle = \langle b \rangle \equiv z^{1/2}$, de modo que o Hamiltoniano torna-se um Hamiltoniano efetivo de partícula independente dado por,

$$H = \sum_{\sigma} \tilde{\epsilon}_d c_{d\sigma}^\dagger c_{d\sigma} + \sum_{k\sigma} \epsilon_{k\sigma} c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma} + \tilde{V} \sum_{k\sigma} \left[c_{k\sigma}^\dagger c_{d\sigma} + c_{d\sigma}^\dagger c_{k\sigma} \right] + \lambda [z - 1], \quad (4.5)$$

onde $\tilde{V} = V\sqrt{z}$. Em princípio, os parâmetros $\langle b^\dagger \rangle$ e $\langle b \rangle$ não têm significado físico bem definido, entretanto z está associado à ausência de elétrons na impureza. O Hamiltoniano acima é efetivamente de partícula independente, que depende dos parâmetros z e λ . Estes parâmetros são determinados pela minimização da energia livre do sistema $\langle H \rangle$ dada por

$$\langle H \rangle = \sum_{\sigma} \tilde{\epsilon}_d \langle c_{d\sigma}^\dagger c_{d\sigma} \rangle + \sum_{k\sigma} \epsilon_{k\sigma} \langle c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma} \rangle + \tilde{V} \sum_{k\sigma} \left[\langle c_{k\sigma}^\dagger c_{d\sigma} \rangle + \langle c_{d\sigma}^\dagger c_{k\sigma} \rangle \right] + \lambda [z - 1], \quad (4.6)$$

em relação aos parâmetros. A condição de mínimo na energia requer que

$$\frac{\partial \langle H \rangle}{\partial \lambda} = 0 \quad (4.7a)$$

e

$$\frac{\partial \langle H \rangle}{\partial z} = 0. \quad (4.7b)$$

Utilizando o teorema de Hellman-Feynman

$$\frac{\partial \langle H(x) \rangle}{\partial x} = \left\langle \frac{\partial H(x)}{\partial x} \right\rangle \quad (4.8)$$

as Eq. (4.7a) e (4.7b) fornecem, respectivamente,

$$z = 1 - n_d \quad (4.9)$$

e

$$\lambda = -z^{-1/2} V \sum_{k\sigma} \langle c_{d\sigma}^\dagger c_{k\sigma} \rangle, \quad (4.10)$$

onde consideramos $\langle c_{d\sigma}^\dagger c_{k\sigma} \rangle = \langle c_{k\sigma}^\dagger c_{d\sigma} \rangle$. Para calcular esses valores esperados, vamos utilizar as funções de Green, cujas expressões podem ser obtidas com as técnicas das equações de movimento, descritas no apêndice A. A função de Green local para a impureza pode ser escrita como,

$$G_{dd}(\omega) = \frac{1}{\omega - \epsilon_d + i\eta - \Sigma(\omega)}, \quad (4.11)$$

onde

$$\Sigma(\omega) = zV^2 \sum_k \frac{1}{\omega - \epsilon_k + i\eta}. \quad (4.12)$$

Por simplicidade, vamos considerar uma densidade de estados constante para os elétrons de condução dada por:

$$\rho_c(\omega) = \frac{1}{2D} \theta(D - \omega) \theta(D + \omega), \quad (4.13)$$

onde D é a largura da banda de condução. Com isso podemos escrever

$$\begin{aligned} \sum_k \frac{1}{\omega - \epsilon_k + i\eta} &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\rho_c(\omega)}{\omega - \epsilon + i\eta} d\epsilon \\ &= \frac{1}{2D} \int_{-D}^D \frac{1}{\omega - \epsilon + i\eta} d\epsilon \\ &= \frac{1}{2D} \left\{ \ln \left[\frac{(D - \omega)^2 + \eta^2}{(D + \omega)^2 + \eta^2} \right]^{1/2} - i\pi \theta(D + \omega) \theta(D - \omega) \right\}. \end{aligned} \quad (4.14)$$

Assim,

$$\Sigma(\omega) = zV^2 \frac{1}{2D} \left\{ \ln \left[\frac{(D - \omega)^2 + \eta^2}{(D + \omega)^2 + \eta^2} \right]^{1/2} - i\pi\theta(D + \omega)\theta(D - \omega) \right\}. \quad (4.15)$$

A densidade de estados da impureza, $\rho_d(\omega) = (-1/\pi)\text{Im}G_{dd}(\omega)$, é uma lorentziana de largura $\tilde{\Gamma} = \pi zV^2/2D = z\Gamma$, onde $\Gamma = \pi V^2/2D$ é a largura do pico no caso do sistema não interagente. Considerando $V \ll D$, o pico da densidade de estados é muito estreito e portanto, se considerarmos ϵ_d longe das bordas da banda podemos desprezar o logaritmo na Eq. (4.15). A Função de Green local pode ser escrita como

$$G_{dd}(\omega) = \frac{1}{\omega - \epsilon_d + i\tilde{\Gamma}}. \quad (4.16)$$

A função de Green não diagonal $G_{kd}(\omega)$ pode ser escrita,

$$G_{kd}(\omega) = \frac{1}{\omega - \epsilon_k + i\eta} \sqrt{z}V G_{dd}(\omega), \quad (4.17)$$

a partir da qual podemos calcular

$$\sum_k \langle c_{d\sigma}^\dagger c_{k\sigma} \rangle = \frac{-1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \text{Im} \sum_k G_{kd}(\omega) f(\omega) d\omega. \quad (4.18)$$

Em $T = 0$ podemos escrever,

$$\begin{aligned} \sum_k \langle c_{d\sigma}^\dagger c_{k\sigma} \rangle &= \frac{-1}{\pi} \int_{-\infty}^{\epsilon_F} \sum_k \text{Im} G_{kd}(\omega) d\omega \\ &\approx \frac{\sqrt{z}V}{2D} \int_{-\infty}^{\epsilon_F} \theta(D + \omega)\theta(D - \omega) \text{Re} G_{dd}(\omega) d\omega \\ &\approx \frac{\sqrt{z}V}{2D} \int_{-D}^{\epsilon_F} \frac{\omega - \tilde{\epsilon}_d}{(\omega - \tilde{\epsilon}_d) + \tilde{\Gamma}^2} d\omega \\ &\approx \frac{\sqrt{z}V}{2D} \ln \left[\frac{(\epsilon_F - \tilde{\epsilon}_d)^2 + \tilde{\Gamma}^2}{(D + \tilde{\epsilon}_d)^2 + \tilde{\Gamma}^2} \right]^{1/2}. \end{aligned} \quad (4.19)$$

Considerando $D \gg \tilde{\epsilon}_d$ temos que,

$$\sum_k \langle c_{d\sigma}^\dagger c_{k\sigma} \rangle = \frac{\sqrt{z}V}{2D} \ln \left\{ \frac{[(\epsilon_F - \tilde{\epsilon}_d)^2 + \tilde{\Gamma}^2]^{1/2}}{D} \right\}. \quad (4.20)$$

Fazendo $\epsilon_F = 0$, pela Eq. (4.10) podemos escrever

$$\lambda = -\frac{V^2}{2D} \ln \left[\frac{(\tilde{\epsilon}_d^2 + \tilde{\Gamma}^2)^{1/2}}{D} \right] \quad (4.21)$$

ou ainda

$$\epsilon_d - \tilde{\epsilon}_d = \frac{\Gamma}{\pi} \ln \left[\frac{(\tilde{\epsilon}_d^2 + \tilde{\Gamma}^2)^{1/2}}{D} \right]. \quad (4.22)$$

Para ϵ_d abaixo do nível de Fermi a equação acima tem uma solução para $\tilde{\epsilon}_d \approx 0$, que corresponde ao regime Kondo. Assim podemos desprezar $\tilde{\epsilon}_d$ do lado esquerdo da equação acima. Define-se a temperatura Kondo T_K por¹

$$(\tilde{\epsilon}_d^2 + \tilde{\Gamma}^2)^{1/2} \equiv T_K = D e^{\frac{\pi \epsilon_d}{\Gamma}}. \quad (4.23)$$

A carga por sua vez pode ser calculada a partir de,

$$\begin{aligned} n_d &= \frac{-1}{\pi} \int_{-\infty}^0 \text{Im} G_{dd}(\omega) d\omega = \frac{\tilde{\Gamma}}{\pi} \int_{-\infty}^0 \frac{1}{(\omega - \tilde{\epsilon}_d)^2 + \tilde{\Gamma}^2} d\omega \\ &= \frac{1}{\pi} \left[\frac{\pi}{2} - \arctg \left(\frac{\tilde{\epsilon}_d}{\tilde{\Gamma}} \right) \right]. \end{aligned} \quad (4.24)$$

As equações (4.10), (4.19) e (4.24) constituem um conjunto de equações auto-consistentes que precisam ser resolvidas numericamente. É notável o fato de que embora o sistema tenha sido reduzido a um sistema efetivo de uma única partícula algumas informações sobre a física de Kondo, que é intrinsecamente um efeito de muitos corpos, estejam contidas nos parâmetros auto-consistentes. A densidade de estados da impureza tem, de fato, um único pico em $\tilde{\epsilon}_d$, que é deslocado na direção do nível de Fermi como resultado da autoconsistência em λ , quando ϵ_d avança para baixo do nível de Fermi. Portanto, a renormalização do estado localizado ϵ_d produz na densidade de estados um pico no nível de Fermi. Esse corresponde ao pico Kondo.

4.2

Além de campo médio

Um tratamento além da aproximação de campo médio no contexto dos bósons escravos deveria levar em conta as flutuações desprezadas na aproximação de campo médio. Uma maneira de incluí-las é levar em conta a

¹Existe uma arbitrariedade na definição da temperatura que depende do modelo. No entanto todas elas têm as mesmas interpretação físicas. Esta expressão coincide com a obtida no capítulo 2.

dinâmica dos operadores bosônicos $b^\dagger$ e b . Nosso objetivo agora é calcular as funções de Green, utilizando o Hamiltoniano bosonizado na sua forma original. Para tratar o sistema em campo médio introduziu-se o vínculo no Hamiltoniano utilizando os multiplicadores de Lagrange. Aqui vamos impor a restrição a cada etapa do processo das equações de movimento. A forma do Hamiltoniano que vamos utilizar é

$$H = \sum_{\sigma} \epsilon_d c_{d\sigma}^\dagger c_{d\sigma} + \sum_{k\sigma} \epsilon_{k\sigma} c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma} + V \sum_{k\sigma} \left[c_{k\sigma}^\dagger c_{d\sigma} b^\dagger + c_{d\sigma}^\dagger c_{k\sigma} b \right]. \quad (4.25)$$

Esse Hamiltoniano juntamente com o vínculo

$$b^\dagger b + \sum_{\sigma} n_{d\sigma} = I, \quad (4.26)$$

contém a física na qual estamos interessados. A função de Green que descreve a dinâmica dos elétrons na impureza é definida como

$$G_{dd}^\sigma(\omega) \equiv \langle\langle b^\dagger c_{d\sigma}; c_{d\sigma}^\dagger b \rangle\rangle \quad (4.27)$$

Aplicando a receita das equações de movimento, podemos escrever

$$\begin{aligned} (\omega - \epsilon_d) \langle\langle b^\dagger c_{d\sigma}; c_{d\sigma}^\dagger b \rangle\rangle &= \langle b^\dagger b \rangle + \langle n_{d\sigma} \rangle + V \sum_k \langle\langle b^\dagger b c_{k\sigma}; c_{d\sigma}^\dagger b \rangle\rangle \\ &+ V \sum_{k\sigma'} \langle\langle c_{d\sigma'}^\dagger c_{d\sigma} c_{k\sigma'}; c_{d\sigma}^\dagger b \rangle\rangle. \end{aligned} \quad (4.28)$$

Substituindo o produto $b^\dagger b$, impondo o vínculo (4.26), podemos escrever

$$\begin{aligned} (\omega - \epsilon_d) \langle\langle b^\dagger c_{d\sigma}; c_{d\sigma}^\dagger b \rangle\rangle &= 1 - \langle n_{d\bar{\sigma}} \rangle + V \sum_k \langle\langle c_{k\sigma}; c_{d\sigma}^\dagger b \rangle\rangle \\ &- V \sum_{k\sigma'} \langle\langle c_{d\sigma'}^\dagger c_{d\sigma} c_{k\sigma'}; c_{d\sigma}^\dagger b \rangle\rangle \\ &+ V \sum_{k\sigma'} \langle\langle c_{d\sigma'}^\dagger c_{d\sigma} c_{k\sigma'}; c_{d\sigma}^\dagger b \rangle\rangle. \end{aligned} \quad (4.29)$$

Somando os índices de spin nos dois últimos termos da equação acima obtemos

$$\begin{aligned} (\omega - \epsilon_d) \langle\langle b^\dagger c_{d\sigma}; c_{d\sigma}^\dagger b \rangle\rangle &= 1 - \langle n_{d\bar{\sigma}} \rangle + V \sum_k \langle\langle c_{k\sigma}; c_{d\sigma}^\dagger b \rangle\rangle \\ &- V \sum_k \langle\langle c_{d\bar{\sigma}}^\dagger c_{d\bar{\sigma}} c_{k\sigma}; c_{d\sigma}^\dagger b \rangle\rangle \\ &+ V \sum_k \langle\langle c_{d\bar{\sigma}}^\dagger c_{d\sigma} c_{k\bar{\sigma}}; c_{d\sigma}^\dagger b \rangle\rangle. \end{aligned} \quad (4.30)$$

É interessante notar que os dois últimos termos da expressão acima envolvem correlações de elétrons com diferentes projeções de spin na impureza e nos elétrons de condução. Esses termos contêm a essência do efeito Kondo; uma correlação antiferromagnética entre elétrons localizados e itinerantes. As equações de movimento para as funções de Green do lado direito da Eq. 4.30 são:

$$(\omega - \epsilon_k) \langle \langle c_{k\sigma}; c_{d\sigma}^\dagger b \rangle \rangle = V \langle \langle b^\dagger c_{d\sigma}; c_{d\sigma}^\dagger b \rangle \rangle, \quad (4.31)$$

$$\begin{aligned} (\omega - \epsilon_k) \langle \langle c_{d\bar{\sigma}}^\dagger c_{d\bar{\sigma}} c_{k\sigma}; c_{d\sigma}^\dagger b \rangle \rangle &= V \langle \langle c_{d\bar{\sigma}}^\dagger c_{d\bar{\sigma}} c_{d\sigma} b^\dagger; c_{d\sigma}^\dagger b \rangle \rangle \\ &+ V \sum_{k'} \langle \langle c_{d\bar{\sigma}}^\dagger c_{k'\bar{\sigma}} c_{k\sigma} b; c_{d\sigma}^\dagger b \rangle \rangle \\ &- V \sum_{k'} \langle \langle c_{k'\bar{\sigma}}^\dagger c_{d\bar{\sigma}} c_{k\sigma} b^\dagger; c_{d\sigma}^\dagger b \rangle \rangle, \end{aligned} \quad (4.32)$$

e

$$\begin{aligned} (\omega - \epsilon_k) \langle \langle c_{d\bar{\sigma}}^\dagger c_{d\sigma} c_{k\bar{\sigma}}; c_{d\sigma}^\dagger b \rangle \rangle &= -\langle c_{d\bar{\sigma}}^\dagger c_{k\bar{\sigma}} b \rangle + V \langle \langle c_{d\bar{\sigma}}^\dagger c_{d\sigma} c_{d\bar{\sigma}} b^\dagger; c_{d\sigma}^\dagger b \rangle \rangle \\ &+ V \sum_{k'} \langle \langle c_{d\bar{\sigma}}^\dagger c_{k'\bar{\sigma}} c_{k\bar{\sigma}} b; c_{d\sigma}^\dagger b \rangle \rangle \\ &+ V \sum_{k'} \langle \langle c_{d\sigma}^\dagger c_{k'\bar{\sigma}}^\dagger c_{k\bar{\sigma}} b^\dagger; c_{d\sigma}^\dagger b \rangle \rangle. \end{aligned} \quad (4.33)$$

A fim de truncar a hierarquia gerada pelas equações de movimento vamos desacoplar as equações fazendo aproximações. As aproximações são essencialmente de dois tipos. Uma consiste em contrair produtos de dois operadores na função de Green e tirá-los para fora da função de Green como valores esperados. Esse tipo de desacoplamento, obviamente, envolve perda de correlação, mas, como veremos, ainda conseguimos reter informações importantes da física de Kondo. O outro tipo de aproximação consiste em desprezar termos de ordem superior a V^2 que contribuiriam na auto-energia.

Na Eq. (4.31) nenhuma aproximação precisa ser feita. Os últimos dois termos da Eq. (4.32) contribuiriam com termos de ordem superior, uma vez que eles contêm correlações entre elétrons de condução com diferentes projeções de spin. O primeiro termo envolve a aniquilação de dois elétrons com diferentes projeções de spin na impureza. Uma vez que não pode haver 2 elétrons na impureza no limite $U \rightarrow \infty$, esse termo de fato deve se anular. Assim podemos escrever:

$$\langle \langle c_{d\bar{\sigma}}^\dagger c_{d\bar{\sigma}} c_{k\sigma}; c_{d\sigma}^\dagger b \rangle \rangle \approx 0. \quad (4.34)$$

Similarmente, na Eq. (4.33) podemos notar que o segundo e terceiro termos são zero e de ordem superior, repectivamente. Fazendo as contrações temos,

$$\langle\langle c_{d\sigma}^\dagger c_{k'\bar{\sigma}}^\dagger c_{k\bar{\sigma}} b^\dagger; c_{d\sigma}^\dagger b \rangle\rangle \approx \langle n_{k\bar{\sigma}} \rangle \langle\langle c_{d\sigma}^\dagger b^\dagger; c_{d\sigma}^\dagger b \rangle\rangle \delta_{k'k}. \quad (4.35)$$

Usando os argumentos acima podemos escrever a Eq. (4.32) como

$$\begin{aligned} (\omega - \epsilon_k) \langle\langle c_{d\bar{\sigma}}^\dagger c_{d\sigma} c_{k\bar{\sigma}}; c_{d\sigma}^\dagger b \rangle\rangle &= -\langle c_{d\bar{\sigma}}^\dagger c_{k\bar{\sigma}} b \rangle + V \langle\langle c_{d\bar{\sigma}}^\dagger c_{d\sigma} c_{d\bar{\sigma}} b^\dagger; c_{d\sigma}^\dagger b \rangle\rangle \\ &+ V \langle n_{k\bar{\sigma}} \rangle \langle\langle b^\dagger c_{d\sigma}; c_{d\sigma}^\dagger b \rangle\rangle. \end{aligned} \quad (4.36)$$

Substituindo as Eqs. (4.34), (4.32) and (4.36) na (4.30) obtemos

$$\begin{aligned} (\omega - \epsilon_d) \langle\langle b^\dagger c_{d\sigma}; c_{d\sigma}^\dagger b \rangle\rangle &= 1 - \langle n_{d\bar{\sigma}} \rangle + V^2 \sum_k \frac{\langle\langle b^\dagger c_{d\sigma}; c_{d\sigma}^\dagger b \rangle\rangle}{\omega - \epsilon_k} - V \sum_k \frac{\langle c_{d\bar{\sigma}}^\dagger c_{k\bar{\sigma}} b \rangle}{\omega - \epsilon_k} \\ &+ V^2 \sum_k \frac{\langle n_{k\bar{\sigma}} \rangle}{\omega - \epsilon_k} \langle\langle b^\dagger c_{d\sigma}; c_{d\sigma}^\dagger b \rangle\rangle. \end{aligned} \quad (4.37)$$

ou mais explicitamente,

$$\langle\langle b^\dagger c_{d\sigma}; c_{d\sigma}^\dagger b \rangle\rangle = \frac{1 - \langle n_{d\bar{\sigma}} \rangle - V \sum_k \frac{\langle c_{d\bar{\sigma}}^\dagger c_{k\bar{\sigma}} b \rangle}{\omega - \epsilon_k}}{\omega - \epsilon_d - V^2 \sum_k \frac{1 + \langle n_{k\bar{\sigma}} \rangle}{\omega - \epsilon_k}}. \quad (4.38)$$

Essa expressão é análoga à expressão 2.43, obtida pela primeira vez por Lacroix[70] para a função de Green da impureza.

Note que na Eq. (4.38) as funções de Green dependem da ocupação dos quase-elétrons $\langle n_{d\bar{\sigma}} \rangle$, grandeza que precisa, portanto, ser calculada autoconsistentemente. Vamos mostrar que as ocupações dos quase-elétrons e dos elétrons reais são idênticas. Para tanto escrevamos

$$\begin{aligned} \langle c_{d\sigma}^\dagger b b^\dagger c_{d\sigma} \rangle &= \langle (1 + b^\dagger b) n_{d\sigma} \rangle \\ &= \langle n_{d\sigma} (1 - n_{d\bar{\sigma}}) \rangle = \langle n_{d\sigma} \rangle - \langle n_{d\sigma} n_{d\bar{\sigma}} \rangle. \end{aligned} \quad (4.39)$$

Desde que $U = \infty$, o último termo dessa equação é nulo. Assim mostramos que

$$\langle c_{d\sigma}^\dagger b b^\dagger c_{d\sigma} \rangle = \langle n_{d\sigma} \rangle. \quad (4.40)$$

A ocupação pode ser calculada por

$$\langle n_{d\sigma} \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \rho_d(\omega) f(\omega) d\omega, \quad (4.41)$$

onde

$$\rho_d(\omega) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} G_{dd}(\omega) \quad (4.42)$$

é a densidade de estados da impureza. De acordo com a equação (A.13) podemos escrever

$$\langle c_{d\sigma}^\dagger c_{k\sigma} b \rangle = -\frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \text{Im} \langle c_{k\sigma}; c_{d\sigma}^\dagger b \rangle f(\omega) d\omega. \quad (4.43)$$

A expressão 4.43 mostra que essa maneira de introduzir as flutuações nos bosons escravos é equivalente ao tratamento usual com as equações de movimento para o Hamiltoniano de Anderson no limite $U \rightarrow \infty$. Vamos calcular novamente a função de Green local utilizando os operadores de projeção de Hubbard. A utilização desses operadores evita os tediosos cálculos envolvidos na obtenção dessa expressão no capítulo 2.

4.3

Operadores de Hubbard

No caso de U finito, os possíveis estados de ocupação da impureza são: vazio ($|0\rangle$) com energia zero, ocupado com um elétron ($|1 \uparrow\rangle$ ou $|1 \downarrow\rangle$), com energia ϵ_d (estados que são degenerados no caso não magnético) e duplamente ocupado $|2 \uparrow\downarrow\rangle$, com energia $2\epsilon_d + U$. No limite $U \rightarrow \infty$ este último estado não pode ser acessado pelo sistema, portanto vamos eliminá-lo do espaço de Hilbert. Definimos os operadores de Hubbard (projetores) como

$$X_{p;q} \equiv |p\rangle\langle q|, \quad (4.44)$$

onde $|p\rangle$ e $|q\rangle$ são estados de ocupação da impureza, excluindo a dupla ocupação. Sendo ortogonais e formando um conjunto completo, eles devem obedecer as relações

$$X_{p;q} X_{p';q'} = X_{p;q} \delta_{p'q} \quad (4.45)$$

e

$$\sum_p X_{p;p} = I. \quad (4.46)$$

Os operadores X assim definidos são projetores sobre os estados $|p\rangle$. De fato, pela Eq (4.45) temos

$$X_{p;p}^2 = X_{p;p}. \quad (4.47)$$

Notação: Vamos definir a seguinte notação para os operadores X . O operador $X_{n,\sigma;m,\sigma'}$ equivale a levar o sistema de um estado da impureza com m elétrons e spin σ' a um estado de n elétrons com spin σ . Mais explicitamente, $X_{1,\sigma;0,0}$ e $X_{0,0;1,\sigma}$ equivalem a criar e aniquilar um elétron, respectivamente. Como consequência, já que o operador $X_{1,\sigma;1,\sigma'}$ satisfaz $X_{1,\sigma;1,\sigma'} = X_{1,\sigma;0,0}X_{0,0;1,\sigma'}$, ele pode ser identificado como $c_{d\sigma}^\dagger c_{d\sigma'}$. A contração $X_{0,0;1,\sigma}X_{1,\sigma;0,0} = X_{0,0;0,0}$, ao contrário do que possa parecer, é de grande importância pois permite reter os efeitos dos processos virtuais que ocorrem entre os estados de ocupação simples e o estado vazio, como veremos adiante.

Com esses operadores o Hamiltoniano de Anderson pode ser escrito como

$$H = \epsilon_d X_{1,\sigma;1,\sigma} + \sum_k c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma} + V \sum_k \left(X_{1,\sigma;0,0} c_{k\sigma} + c_{k\sigma}^\dagger X_{0,0;1,\sigma} \right). \quad (4.48)$$

A função de Green local, na qual estamos interessados, pode ser escrita como.

$$G_{dd}^\sigma(\omega) \equiv \langle \langle X_{0,0;1,\sigma}; X_{1,\sigma;0,0} \rangle \rangle. \quad (4.49)$$

Aplicando as equações de movimento juntamente com as relações de contração que os operadores de Hubbard obedecem podemos escrever:

$$\begin{aligned} (\omega - \epsilon_d) \langle \langle X_{0,0;1,\sigma}; X_{1,\sigma;0,0} \rangle \rangle &= \langle X_{0,0;0,0} \rangle + \langle X_{1,\sigma;1,\sigma} \rangle \\ &+ V \sum_k \langle \langle X_{0,0;0,0} c_{k\sigma}; X_{1,\sigma;0,0} \rangle \rangle \\ &+ V \sum_{k\sigma'} \langle \langle X_{1,\sigma';1,\sigma} c_{k\sigma'}; X_{1,\sigma;0,0} \rangle \rangle. \end{aligned} \quad (4.50)$$

e

$$\begin{aligned} (\omega - \epsilon_k) \langle \langle X_{0,0;0,0}; X_{1,\sigma;0,0} \rangle \rangle &= \langle X_{1,\sigma;0,0} c_{k\sigma} \rangle \\ &+ V \sum_{k'\sigma'} \langle \langle X_{1,\sigma';1,\sigma} c_{k'\sigma'} c_{k\sigma}; X_{1,\sigma;0,0} \rangle \rangle \\ &- V \sum_{k'\sigma'} \langle \langle X_{0,0;1,\sigma'} c_{k'\sigma'}^\dagger c_{k\sigma}; X_{1,\sigma;0,0} \rangle \rangle \\ &+ V \langle \langle X_{0,0;0,0}; X_{1,\sigma;0,0} \rangle \rangle. \end{aligned} \quad (4.51)$$

Desprezando a primeira função de Green do lado direito da última equação, por dar uma contribuição de order superior na auto-energia, e fazendo o

desacoplamento,

$$\langle\langle X_{0,0;1,\sigma'} c_{k'\sigma'}^\dagger c_{k\sigma}; X_{1,\sigma;0,0} \rangle\rangle = \langle n_{k\sigma} \rangle \langle\langle X_{0,0;1,\sigma'}; X_{1,\sigma;0,0} \rangle\rangle \delta_{k'k} \delta_{\sigma'\sigma}, \quad (4.52)$$

podemos escrever a Eq. (4.51) como

$$\begin{aligned} (\omega - \epsilon_k) \langle\langle X_{0,0;0,0}; X_{1,\sigma;0,0} \rangle\rangle &= \langle X_{1,\sigma;0,0} c_{k\sigma} \rangle - V \langle n_{k\sigma} \rangle \langle\langle X_{0,0;1,\sigma}; X_{1,\sigma;0,0} \rangle\rangle \\ &+ V \langle\langle X_{0,0;0,0}; X_{1,\sigma;0,0} \rangle\rangle. \end{aligned} \quad (4.53)$$

Para o último termo na Eq. (4.50) temos

$$\begin{aligned} (\omega - \epsilon_k) \langle\langle X_{1,\sigma';1,\sigma} c_{k\sigma'}; X_{1,\sigma;0,0} \rangle\rangle &= -\langle X_{1,\sigma;0,0} \rangle \\ &+ V \sum_{k'} \langle\langle X_{1,\sigma';0,0} c_{k'\sigma} c_{k\sigma}; X_{1,\sigma;0,0} \rangle\rangle \\ &+ V \sum_{k'} \langle\langle X_{0,0;1,\sigma} c_{k'\sigma'}^\dagger c_{k\sigma'}; X_{1,\sigma;0,0} \rangle\rangle. \end{aligned} \quad (4.54)$$

Fazendo aproximações similares às anteriores obtemos

$$(\omega - \epsilon_k) \langle\langle X_{1,\sigma';1,\sigma} c_{k\sigma'}; X_{1,\sigma;0,0} \rangle\rangle = -\langle X_{1,\sigma;0,0} \rangle + V \langle n_{k\sigma'} \rangle \langle\langle X_{0,0;1,\sigma}; X_{1,\sigma;0,0} \rangle\rangle. \quad (4.55)$$

Substituindo as Eqs. (4.53) e (4.54) na Eq. (4.50) temos

$$\begin{aligned} (\omega - \epsilon_d) \langle\langle X_{0,0;1,\sigma}; X_{1,\sigma;0,0} \rangle\rangle &= 1 - \langle X_{1,\bar{\sigma};1,\bar{\sigma}} \rangle + V \sum_k \frac{\langle X_{1,\sigma;0,0} c_{k\sigma} \rangle}{\omega - \epsilon_k} \\ &+ V^2 \sum_k \frac{\langle\langle X_{0,0;1,\sigma}; X_{1,\sigma;0,0} \rangle\rangle}{\omega - \epsilon_k} \\ &- V^2 \sum_k \frac{\langle n_{k\sigma} \rangle \langle\langle X_{0,0;1,\sigma}; X_{1,\sigma;0,0} \rangle\rangle}{\omega - \epsilon_k} \\ &- V \sum_k \frac{\langle X_{1,\sigma;0,0} c_{k\sigma} \rangle}{\omega - \epsilon_k} \\ &+ V^2 \sum_k \frac{\langle n_{k\sigma} \rangle \langle\langle X_{0,0;1,\sigma}; X_{1,\sigma;0,0} \rangle\rangle}{\omega - \epsilon_k} \\ &- V \sum_k \frac{\langle X_{1,\bar{\sigma};0,0} c_{k\bar{\sigma}} \rangle}{\omega - \epsilon_k} \\ &+ V^2 \sum_k \frac{\langle n_{k\bar{\sigma}} \rangle \langle\langle X_{0,0;1,\sigma}; X_{1,\sigma;0,0} \rangle\rangle}{\omega - \epsilon_k}. \end{aligned} \quad (4.56)$$

Somando cuidadosamente os índices de spin obtemos finalmente

$$\langle\langle X_{0,0;1,\sigma}; X_{1,\sigma;0,0} \rangle\rangle = \frac{1 - \langle X_{1,\bar{\sigma};1,\bar{\sigma}} \rangle - V \sum_k \frac{\langle X_{1,\bar{\sigma};0,0} c_{k\bar{\sigma}} \rangle}{\omega - \epsilon_k}}{\omega - \epsilon_d - V^2 \sum_k \frac{1 + \langle n_{k\bar{\sigma}} \rangle}{\omega - \epsilon_k}}. \quad (4.57)$$

A expressão (4.57) tem a mesma informação física contida na Eq. (4.38). Os valores esperados podem ser calculados autoconsistentemente por,

$$\langle X_{1\sigma;1\sigma} \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \rho(\omega) f(\omega) d\omega, \quad (4.58)$$

onde

$$\rho(\omega) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \langle\langle X_{0,0;1,\sigma}; X_{1,\sigma;0,0} \rangle\rangle \quad (4.59)$$

e $f(\omega)$ é a distribuição de Fermi. Finalmente,

$$\langle X_{1\bar{\sigma};0,0} c_{k\bar{\sigma}} \rangle = -\frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \text{Im} \langle\langle c_{k\sigma}; X_{1,\sigma;0,0} \rangle\rangle f(\omega) d\omega. \quad (4.60)$$

O cálculo das funções de Green usando os operadores de Hubbard mostra-se ser muito mais simples no caso de $U = \infty$ do que fazer equações de movimento para o Hamiltoniano de Anderson original.

Comparando esses resultados com os resultados obtidos na seção anterior, vemos que introduzir flutuações no método dos bosons escravos é equivalente a tratar o problema via equação de movimento. A relação entre os bosons escravos e os operadores de Hubbard são ainda mais estreitas. Eles satisfazem

$$X_{1,\sigma;0,0} \Leftrightarrow c_{d\sigma}^\dagger b \quad (4.61)$$

e

$$X_{0,0;1,\sigma} \Leftrightarrow b^\dagger c_{d\sigma}. \quad (4.62)$$

Como vimos, os operadores $X_{0,0;1,\sigma} X_{1,\sigma;0,0} = X_{0,0;0,0}$ e $X_{1,\sigma;0,0} X_{0,0;1,\sigma} = X_{1,\sigma;1,\sigma}$ são projetores sobre os estados vazio e de ocupação simples. Similarmente, com os bosons escravos obtemos o mesmo resultado. De fato, usando a restrição (4.26) encontramos

$$b^\dagger c_{d\sigma} c_{d\sigma}^\dagger b = b^\dagger b (1 - n_{d\sigma}) = (1 - n_{d\sigma}) (1 - n_{d\bar{\sigma}}) \quad (4.63)$$

e

$$c_{d\sigma}^\dagger b b^\dagger c_{d\sigma} = n_{d\sigma} (1 + b^\dagger b) = n_{d\sigma} (1 - n_{d\bar{\sigma}}), \quad (4.64)$$

o que mostra que eles são projetores sobre os estados vazio e de ocupação simples, respectivamente.

4.4

Bosons escravos para U finito: única impureza

O método de bosons escravos na aproximação de campo médio tem sido usado não somente para o caso de U infinito, onde está proibida a dupla ocupação, mas também para U finito onde esta está permitida. A fim de dar uma breve introdução ao método de bosons escravos para U finito, consideremos primeiramente o caso de uma única impureza acoplada a um reservatório através de contatos pontuais metálicos. O sistema é descrito pelo Hamiltoniano de Anderson²

$$H = \sum_{\sigma} \epsilon_d c_{d\sigma}^\dagger c_{d\sigma} + U n_{d\uparrow} n_{d\downarrow} + \sum_{k\sigma} \epsilon_k c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma} + V \sum_{k\sigma} \left(c_{d\sigma}^\dagger c_{k\sigma} + c_{k\sigma}^\dagger c_{d\sigma} \right), \quad (4.65)$$

onde $c_{d\sigma}^\dagger$ ($c_{d\sigma}$) cria (aniquila) uma partícula fermiônica na impureza. Por simplicidade, consideramos que o acoplamento entre a impureza e o reservatório seja independente de k , isto é, $V_k = V$.

Para o caso de U finito o espaço de Hilbert é aumentado pela introdução de novos operadores bosônicos $e^\dagger$ (e), $p_\sigma^\dagger$ (p_σ) e $d^\dagger$ (d), onde esses operadores, junto com os operadores fermiônicos, criam (aniquilam) na impureza um estado vazio, ocupado com uma única partícula com spin “up” ($\sigma = \uparrow$), ocupado com uma única partícula com spin “down” ($\sigma = \downarrow$) e duplamente ocupado, respectivamente. Denotemos esses estados, respectivamente, por $|0\rangle$, $|\sigma\rangle$ e $|d\rangle$. A partir do vácuo, esses estados são criados como segue:

$$\begin{aligned} |0\rangle &= e^\dagger |vac\rangle \\ |\sigma\rangle &= c_{d\sigma}^\dagger p_\sigma^\dagger |vac\rangle \\ |d\rangle &= c_{d\sigma}^\dagger c_{d\bar{\sigma}}^\dagger d_\sigma^\dagger |vac\rangle. \end{aligned} \quad (4.66)$$

Observe que omitimos o subíndice d nos operadores bosônicos pois supomos que eles atuam exclusivamente na impureza, ao contrário dos fermiônicos que atuam tanto na impureza quanto no reservatório. A idéia agora é escrever o Hamiltoniano com o auxílio dos novos operadores. A fim

²A extensão para o caso de mais de uma impureza é imediata e será mostrada em um caso concreto mais adiante.

de restringir o espaço de Hilbert total ao espaço de significado físico devemos impor as seguintes condições a serem respeitadas,

$$P \equiv e^\dagger e + \sum_{\sigma} p_{\sigma}^{\dagger} p_{\sigma} + d^{\dagger} d - 1 = 0 \quad (4.67)$$

e

$$Q_{\sigma} \equiv c_{d\sigma}^{\dagger} c_{d\sigma} - p_{\sigma}^{\dagger} p_{\sigma} - d^{\dagger} d = 0. \quad (4.68)$$

A primeira condição garante que a impureza estará, vazia, com um férmion ou duplamente ocupada com dois férmions. A segunda garante que se existir um férmion com spin σ na impureza ela está ocupada com um férmion ou duplamente ocupada. Esta última também estabelece uma relação entre os operadores bosônicos e fermiônicos. É importante notar que o espaço de Hilbert assim restrito constitui um espaço completo. Isto é garantido pois $[P, H]_- = [Q_{\sigma}, H]_- = 0$, e significa que uma vez estando no espaço restrito permanecemos nele. Em outras palavras, os auto estados do Hamiltoniano servem de base para os operadores P e Q_{σ} . Além disso, uma vez que esses operadores comutam com o Hamiltoniano, os auto-estados do Hamiltoniano também são auto-estados desses operadores.

Antes devemos observar que ao aniquilarmos um férmion com spin σ estamos na verdade deixando a impureza com zero férmion (caso haja inicialmente apenas um fermion com spin σ) ou com um elétron com spin $\bar{\sigma}$ (caso a impureza esteja inicialmente duplamente ocupada). Portanto precisamos levar em conta os dois casos. Para tanto os operadores fermiônicos da impureza deverão ser substituídos por

$$\begin{aligned} c_{d\sigma}^{\dagger} &\rightarrow c_{d\sigma}^{\dagger} z_{\sigma}^{\dagger} \\ c_{d\sigma} &\rightarrow z_{\sigma} c_{d\sigma}, \end{aligned} \quad (4.69)$$

onde definimos o operador z como

$$z_{\sigma} = [1 - d^{\dagger} d - p_{\sigma}^{\dagger} p_{\sigma}]^{-1/2} (e^{\dagger} p_{\sigma} + p_{\bar{\sigma}}^{\dagger} d) [1 - e^{\dagger} e - p_{\bar{\sigma}}^{\dagger} p_{\bar{\sigma}}]^{-1/2}. \quad (4.70)$$

Esse operador assim definido com os dois fatores de raiz quadrada de combinações de operadores reproduz o limite não interagente ($U \rightarrow 0$). Assim

podemos reescrever o Hamiltoniano como

$$H = \sum_{\sigma} \epsilon_d c_{d\sigma}^{\dagger} c_{d\sigma} + U d^{\dagger} d + \sum_{k\sigma} \epsilon_k c_{k\sigma}^{\dagger} c_{k\sigma} + V \sum_{k\sigma} \left(c_{d\sigma}^{\dagger} z_{\sigma}^{\dagger} c_{k\sigma} + c_{k\sigma}^{\dagger} z_{\sigma} c_{d\sigma} \right) + \lambda_1 P + \lambda_{2\sigma} Q_{\sigma}. \quad (4.71)$$

Os vínculos P e Q_{σ} foram adicionados ao Hamiltoniano por meio de multiplicadores de Lagrange λ_1 e $\lambda_{2\sigma}$. A aproximação de campo médio consiste em substituir os operadores por seus valores esperados, de modo que

$$\begin{aligned} e &\rightarrow \langle e \rangle \\ p_{\sigma} &\rightarrow \langle p_{\sigma} \rangle \\ d &\rightarrow \langle d \rangle. \end{aligned} \quad (4.72)$$

Também considera-se $\langle x^{\dagger} \rangle = \langle x \rangle$, onde x denota qualquer operador bosônico. Similarmente ao caso de U infinito, os valores esperados desses operadores não têm uma interpretação física bem definida, entretanto o quadrado deles está associado à ausência, à presença de um e de dois elétrons na impureza. Adotando esta aproximação podemos escrever um Hamiltoniano efetivo como

$$H_{CM} = \sum_{\sigma} \tilde{\epsilon}_{d\sigma} c_{d\sigma}^{\dagger} c_{d\sigma} + U \langle d \rangle^2 + \sum_{k\sigma} \epsilon_k c_{k\sigma}^{\dagger} c_{k\sigma} + \sum_{k\sigma} \tilde{V}_{\sigma} \left(c_{d\sigma}^{\dagger} c_{k\sigma} + c_{k\sigma}^{\dagger} c_{d\sigma} \right) + \lambda_1 \left(\sum_{\sigma} \langle p_{\sigma} \rangle^2 + \langle e \rangle^2 + \langle d \rangle^2 - 1 \right) - \lambda_{2\sigma} (\langle p_{\sigma} \rangle^2 + \langle d \rangle^2), \quad (4.73)$$

onde, por questão de notação definimos, $\tilde{\epsilon}_{d\sigma} = \epsilon_d + \lambda_{2\sigma}$ e $\tilde{V}_{\sigma} = V \bar{z}_{\sigma}$, com $\bar{z}_{\sigma} = (1 - \langle d \rangle^2 - \langle p_{\sigma} \rangle^2)^{-1/2} [\langle c \rangle \langle p_{\sigma} \rangle + \langle p_{\bar{\sigma}} \rangle \langle d \rangle] (1 - \langle e \rangle^2 - \langle p_{\bar{\sigma}} \rangle^2)^{-1/2}$. Obtivemos portanto um Hamiltoniano efetivo para um quasi-elétron não interagente. O Hamiltoniano contém agora um conjunto de 7 parâmetros desconhecidos, a saber, os quatro valores esperados dos operadores bosônicos e os três multiplicadores de Lagrange. Essas quantidades são determinadas pela minimização da energia do sistema com relação a esses parâmetros. A energia é definida como.

$$E = \langle H_{CM} \rangle. \quad (4.74)$$

A condição necessária para que E seja mínima é dada por

$$\frac{\partial E}{\partial x} = 0, \quad (4.75)$$

Usando o teorema de Hellman-Feynman podemos escrever,

$$\frac{\partial E}{\partial x} = \frac{\partial \langle H_{CM} \rangle}{\partial x} = \left\langle \frac{\partial H_{CM}}{\partial x} \right\rangle = 0, \quad (4.76)$$

onde x denota todos os parâmetros com relação aos quais E deve ser mínima. A equação acima constitui um sistema não linear de sete equações através das quais podemos determinar numericamente os parâmetros. Escrevendo explicitamente as equações temos:

$$\sum_{k\sigma} \frac{\partial \tilde{V}_\sigma}{\partial \langle e \rangle} \left(\langle c_{d\sigma}^\dagger c_{k\sigma} \rangle + \langle c_{k\sigma}^\dagger c_{d\sigma} \rangle \right) + 2\lambda_1 \langle e \rangle = 0 \quad (4.77a)$$

$$\sum_{k\sigma} \frac{\partial \tilde{V}_\sigma}{\partial \langle p_\uparrow \rangle} \left(\langle c_{d\sigma}^\dagger c_{k\sigma} \rangle + \langle c_{k\sigma}^\dagger c_{d\sigma} \rangle \right) + 2(\lambda_1 - \lambda_{2\uparrow}) \langle p_\uparrow \rangle = 0 \quad (4.77b)$$

$$\sum_{k\sigma} \frac{\partial \tilde{V}_\sigma}{\partial \langle p_\downarrow \rangle} \left(\langle c_{d\sigma}^\dagger c_{k\sigma} \rangle + \langle c_{k\sigma}^\dagger c_{d\sigma} \rangle \right) + 2(\lambda_1 - \lambda_{2\downarrow}) \langle p_\downarrow \rangle = 0 \quad (4.77c)$$

$$\sum_{k\sigma} \frac{\partial \tilde{V}_\sigma}{\partial \langle d \rangle} \left(\langle c_{d\sigma}^\dagger c_{k\sigma} \rangle + \langle c_{k\sigma}^\dagger c_{d\sigma} \rangle \right) + 2\langle d \rangle (\lambda_1 - \lambda_{2\uparrow} - \lambda_{2\downarrow}) + 2U\langle d \rangle = 0 \quad (4.77d)$$

$$\langle e \rangle^2 + \langle p_\uparrow \rangle^2 + \langle p_\downarrow \rangle^2 + \langle d \rangle^2 - 1 = 0 \quad (4.77e)$$

$$\langle n_{d\uparrow} \rangle - \langle p_\uparrow \rangle^2 - \langle d \rangle^2 = 0 \quad (4.77f)$$

$$\langle n_{d\downarrow} \rangle - \langle p_\downarrow \rangle^2 - \langle d \rangle^2 = 0 \quad (4.77g)$$

Os valores esperados $\sum_k \langle c_{d\sigma}^\dagger c_{k\sigma} \rangle$, $\sum_k \langle c_{k\sigma}^\dagger c_{d\sigma} \rangle$ e a ocupação $\langle n_{d\sigma} \rangle$ são dados por

$$\langle n_{d\sigma} \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} -\frac{1}{\pi} \text{Im} G_{dd}^\sigma(\omega) f(\omega) d\omega, \quad (4.78)$$

$$\sum_k \langle c_{d\sigma}^\dagger c_{k\sigma} \rangle = \sum_k \langle c_{k\sigma}^\dagger c_{d\sigma} \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} -\frac{1}{\pi} \text{Im} \sum_k G_{kd}^\sigma(\omega) f(\omega) d\omega, \quad (4.79)$$

onde $f(\omega)$ é a função de Fermi. As funções de Green retardadas $G_{dd}^\sigma(\omega)$ e $G_{kd}^\sigma(\omega)$ são facilmente determinadas usando o Hamiltoniano efetivo e as equações de movimento. Elas podem ser escritas,

$$G_{dd}^\sigma = \frac{1}{\omega - \tilde{\epsilon}_d + i\eta - \tilde{V}_\sigma^2 \sum_k \frac{1}{\omega - \epsilon_k + i\eta}} \quad (4.80)$$

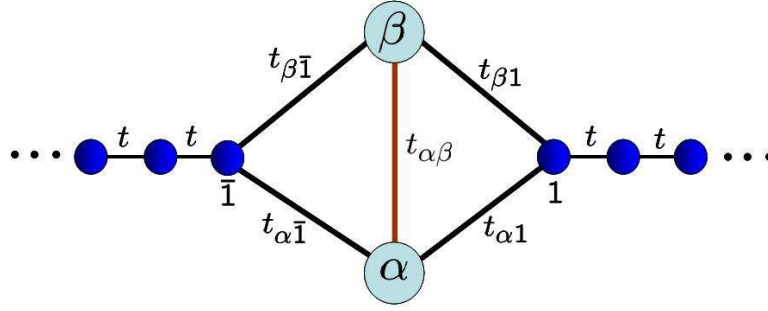


Figura 4.1: Representação esquemática de dois pontos quânticos conectados a dois reservatórios de elétrons.

e

$$G_{kd}^{\sigma}(\omega) = \sum_k \frac{1}{\omega - \epsilon_k + i\eta} \tilde{V} G_{dd}^{\sigma}(\omega). \quad (4.81)$$

Todos os valores esperados devem ser calculados autoconsistentemente. No que segue vamos aplicar essa teoria ao caso de dois pontos quânticos acoplados a reservatórios de elétrons livres.

4.5

Regime Kondo de uma molécula de pontos quânticos: Uma abordagem via bosons escravos para U finito

Nessa seção vamos estudar os casos de dois pontos quânticos, α e β , acoplados em série e em paralelo a dois reservatórios R e L . Diversas topologias com dois pontos quânticos tem sido estudadas experimentalmente, dentre eles podemos mencionar o trabalho de van der Wiel *et al.*, Ref. [86] e de Jeong *et al.* na Ref. [14]. Embora muitos estudos teóricos têm sido apresentados para esse sistema, utilizando diversas abordagens[87, 88, 89, 90], a riqueza da física desse sistema merece mais atenção. Esse sistema, por exemplo, tem um aspecto interessante que é a possibilidade de se obter efeito Kondo com spin total $S=1$, que tem sido um assunto de bastante interesse nos últimos anos[33, 91]. Nosso objetivo principal é estudar a condutância do sistema no regime Kondo[92]. No caso da configuração em série, que é a mais estudada, nossos principais resultados surgem do estudo da condutância em função do acoplamento entre os PQs e da degenerescência destes. Na configuração em paralelo, o principal aspecto estudado é o efeito do acoplamento direto entre os PQs na condutância sistema. O modelo está esquematicamente representado na Fig. (4.1) A física

do sistema será descrita pelo Hamiltoniano

$$\begin{aligned}
 H = & \sum_{\substack{i=\alpha,\beta \\ \sigma}} \epsilon_i c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma} + U \sum_{i=\alpha,\beta} n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} + \sum_{\substack{i=-1 \\ \sigma}}^{-\infty} \left[t c_{i\sigma}^\dagger c_{i-1\sigma} + H.c. \right] \\
 & + \sum_{i=1}^{\infty} \left[t c_{i\sigma}^\dagger c_{i+1\sigma} + H.c. \right] + \sum_{\sigma} \left[t_{\alpha\beta} c_{\alpha\sigma}^\dagger c_{\beta\sigma} + H.c. \right] \\
 & + \sum_{\substack{i=-1,1 \\ j=\alpha,\beta \\ \sigma}} \left[t_{ij} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + H.c. \right], \tag{4.82}
 \end{aligned}$$

onde $c_{i\sigma}^\dagger$ ($c_{i\sigma}$) cria (aniquila) um elétron no i -ésimo sítio com projeção de spin $\sigma = \uparrow, \downarrow$. Os pontos quânticos estão indexados pelas letras gregas α e β . O primeiro termo é o termo da energia diagonal dos elétrons no ponto quântico³. A energia ϵ_i do i -ésimo nível é controlada pelo potencial de porta $V_g^{(i)}$, de modo que $\epsilon_i = \epsilon_i^{(0)} + V_g^{(i)}$. O segundo descreve a repulsão Coulombina entre dois elétrons que eventualmente ocupam o mesmo ponto quântico. O terceiro descreve os reservatórios, o quarto e o quinto termos descrevem os contatos entre os pontos quânticos e entre eles e os reservatórios, respectivamente.

Nesse caso de duas impurezas os bosons escravos introduzidos na seção anterior deverão ser utilizados para cada uma delas. Vamos então introduzir um índice $i = \alpha, \beta$ nos operadores bosônicos, os quais poderão ser escritos como $e_i^\dagger$ (e_i), $p_{i\sigma}^\dagger$ ($p_{i\sigma}$) e $d_i^\dagger$ (d_i), sendo interpretados de maneira análoga ao caso de uma única impureza. Analogamente os operadores fermiônicos $c_{i\sigma}^\dagger$ e $c_{i\sigma}$ serão substituídos por $c_{i\sigma}^\dagger z_{i\sigma}^\dagger$ e $c_{i\sigma} z_{i\sigma}$, respectivamente, com

$$z_{i\sigma} = \left[1 - d_i^\dagger d_i - p_{i\sigma}^\dagger p_{i\sigma} \right]^{-1/2} \left(e_i^\dagger p_{i\sigma} + p_{i\bar{\sigma}}^\dagger d_i \right) \left[1 - e_i^\dagger e_i - p_{i\bar{\sigma}}^\dagger p_{i\bar{\sigma}} \right]^{-1/2}. \tag{4.83}$$

e

$$z_{i\sigma}^\dagger = \left[1 - d_i^\dagger d_i - p_{i\sigma}^\dagger p_{i\sigma} \right]^{-1/2} \left(p_{i\sigma}^\dagger e + d_i^\dagger p_{i\bar{\sigma}} \right) \left[1 - e_i^\dagger e_i - p_{i\bar{\sigma}}^\dagger p_{i\bar{\sigma}} \right]^{-1/2}. \tag{4.84}$$

Os vínculos:

$$P_i \equiv e_i^\dagger e_i + \sum_{\sigma} p_{i\sigma}^\dagger p_{i\sigma} + d_i^\dagger d_i - 1 = 0 \tag{4.85}$$

e

$$Q_{i\sigma} \equiv c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma} - p_{i\sigma}^\dagger p_{i\sigma} - d_i^\dagger d_i = 0. \tag{4.86}$$

³Devido aos contatos com os reservatório os elétrons no ponto quântico terão uma energia diagonal renormalizada.

serão introduzidos no Hamiltoniano por meio de multiplicadores de Lagrange $\lambda_i^{(1)}$ e $\lambda_{i\sigma}^{(2)}$. Na aproximação de campo médio, todos os operadores bosônicos serão substituídos pelos seus respectivos valores esperados. Assim o Hamiltoniano de campo médio efetivo pode ser escrito como,

$$\begin{aligned}
 H_{MF} = & \sum_{\substack{i=\alpha,\beta \\ \sigma}} \tilde{\epsilon}_i c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma} + U \sum_{i=\alpha,\beta} \langle d_i \rangle^2 + \sum_{\substack{i=1 \\ \sigma}}^{\infty} t \left[c_{i\sigma}^\dagger c_{i+1\sigma} + c_{-i\sigma}^\dagger c_{-i-1\sigma} + H.c. \right] \\
 & + \sum_{\sigma} \left[V_{\alpha\beta}^\sigma c_{\alpha\sigma}^\dagger c_{\beta\sigma} + H.c. \right] + \sum_{\substack{i=-1,1 \\ j=\alpha,\beta \\ \sigma}} \left[V_{ij}^\sigma c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + H.c. \right] \\
 & + \sum_{i=\alpha,\beta} \lambda_i^{(1)} \left[\sum_{\sigma} \langle p_{i\sigma} \rangle^2 + \langle e_i \rangle^2 + \langle d_i \rangle^2 - 1 \right] - \sum_{\substack{i=\alpha,\beta \\ \sigma}} \lambda_{i\sigma}^{(2)} \left[\langle p_{i\sigma} \rangle^2 + \langle d_i \rangle^2 \right],
 \end{aligned} \tag{4.87}$$

onde

$$V_{ij}^\sigma = \begin{cases} \bar{z}_{i\sigma} t_{ij} & \text{se } i \text{ ou } j \in \{-1, 1\} \\ \bar{z}_{i\sigma} t_{ij} \bar{z}_{j\sigma} & \text{se } i \text{ e } j \in \{\alpha, \beta\} \end{cases}.$$

Obtemos assim um conjunto de 14 parâmetros livres, os quais serão determinados pela minimização da energia livre $\langle H_{MF} \rangle$ com relação a esses parâmetros. As condições de minimização da energia livre nos fornece o sistema

de equações não-lineares

$$\sum_{\sigma} (M_{\alpha\sigma} + N_{\sigma} \bar{z}_{\beta\sigma}) \frac{\partial \bar{z}_{\alpha\sigma}}{\partial \langle e_{\alpha} \rangle} + 2\lambda_{\alpha}^{(1)} \langle e_{\alpha} \rangle = 0 \quad (4.88a)$$

$$\sum_{\sigma} (M_{\alpha\sigma} + N_{\sigma} \bar{z}_{\beta\sigma}) \frac{\partial \bar{z}_{\alpha\sigma}}{\partial \langle d_{\alpha} \rangle} + 2 \left(\lambda_{\alpha}^{(1)} - \lambda_{\alpha\sigma}^{(2)} - \lambda_{\alpha\bar{\sigma}}^{(2)} \right) \langle d_{\alpha} \rangle = 0 \quad (4.88b)$$

$$\sum_{\sigma'} (M_{\alpha\sigma'} + N_{\sigma'} \bar{z}_{\beta\sigma'}) \frac{\partial \bar{z}_{\alpha\sigma'}}{\partial \langle p_{\alpha\sigma} \rangle} + 2 \left(\lambda_{\alpha}^{(1)} - \lambda_{\alpha\sigma}^{(2)} - \right) \langle p_{\alpha\sigma} \rangle = 0 \quad (4.88c)$$

$$\sum_{\sigma'} (M_{\alpha\sigma'} + N_{\sigma'} \bar{z}_{\beta\sigma'}) \frac{\partial \bar{z}_{\alpha\sigma'}}{\partial \langle p_{\alpha\bar{\sigma}} \rangle} + 2 \left(\lambda_{\alpha}^{(1)} - \lambda_{\alpha\bar{\sigma}}^{(2)} - \right) \langle p_{\alpha\bar{\sigma}} \rangle = 0 \quad (4.88d)$$

$$\langle p \rangle_{\alpha\sigma}^2 + \langle p \rangle_{\alpha\bar{\sigma}}^2 + \langle e \rangle_{\alpha}^2 + \langle d \rangle_{\alpha}^2 - 1 = 0 \quad (4.88e)$$

$$\langle n_{\alpha\sigma} \rangle - \langle p \rangle_{\alpha\sigma}^2 - \langle d \rangle_{\alpha}^2 = 0 \quad (4.88f)$$

$$\langle n_{\alpha\bar{\sigma}} \rangle - \langle p \rangle_{\alpha\bar{\sigma}}^2 - \langle d \rangle_{\alpha}^2 = 0 \quad (4.88g)$$

$$\sum_{\sigma} (M_{\beta\sigma} + N_{\sigma} \bar{z}_{\alpha\sigma}) \frac{\partial \bar{z}_{\beta\sigma}}{\partial \langle e_{\beta} \rangle} + 2\lambda_{\beta}^{(1)} \langle e_{\beta} \rangle = 0 \quad (4.88h)$$

$$\sum_{\sigma} (M_{\beta\sigma} + N_{\sigma} \bar{z}_{\alpha\sigma}) \frac{\partial \bar{z}_{\beta\sigma}}{\partial \langle d_{\beta} \rangle} + 2 \left(\lambda_{\beta}^{(1)} - \lambda_{\beta\sigma}^{(2)} - \lambda_{\beta\bar{\sigma}}^{(2)} \right) \langle d_{\beta} \rangle = 0 \quad (4.88i)$$

$$\sum_{\sigma'} (M_{\beta\sigma'} + N_{\sigma'} \bar{z}_{\alpha\sigma'}) \frac{\partial \bar{z}_{\beta\sigma'}}{\partial \langle p_{\beta\sigma} \rangle} + 2 \left(\lambda_{\beta}^{(1)} - \lambda_{\beta\sigma}^{(2)} \right) \langle p_{\beta\sigma} \rangle = 0 \quad (4.88j)$$

$$\sum_{\sigma'} (M_{\beta\sigma'} + N_{\sigma'} \bar{z}_{\alpha\sigma'}) \frac{\partial \bar{z}_{\beta\sigma'}}{\partial \langle p_{\beta\bar{\sigma}} \rangle} + 2 \left(\lambda_{\beta}^{(1)} - \lambda_{\beta\bar{\sigma}}^{(2)} \right) \langle p_{\beta\bar{\sigma}} \rangle = 0 \quad (4.88k)$$

$$\langle p_{\beta\sigma}^2 \rangle + \langle p_{\beta\bar{\sigma}}^2 \rangle + \langle e \rangle_{\beta}^2 + \langle d_{\beta} \rangle^2 - 1 = 0 \quad (4.88l)$$

$$\langle n_{\beta\sigma} \rangle - \langle p \rangle_{\beta\sigma}^2 - \langle d \rangle_{\beta}^2 = 0 \quad (4.88m)$$

$$\langle n_{\beta\bar{\sigma}} \rangle - \langle p \rangle_{\beta\bar{\sigma}}^2 - \langle d \rangle_{\beta}^2 = 0, \quad (4.88n)$$

onde

$$M_{i\sigma} = \sum_{\substack{i=\alpha,\beta \\ j=1,1}} \left[t_{ji} \langle c_{i\sigma}^{\dagger} c_{j\sigma} \rangle + t_{ij} \langle c_{j\sigma}^{\dagger} c_{i\sigma} \rangle \right] \quad (4.89)$$

e

$$N_{\sigma} = t_{\alpha\beta} \langle c_{\beta\sigma}^{\dagger} c_{\alpha\sigma} \rangle + t_{\beta\alpha} \langle c_{\alpha\sigma}^{\dagger} c_{\beta\sigma} \rangle. \quad (4.90)$$

Os valores esperados são calculados por

$$\langle c_{i\sigma}^{\dagger} c_{j\sigma} \rangle = i \int_{-\infty}^{\infty} [G_{ji}^{\sigma}(\omega + i\eta) - G_{ji}^{\sigma}(\omega - i\eta)] f(\omega) d\omega, \quad (4.91)$$

onde $G_{ij}^\sigma(\omega)$ é a função de única partícula definida usualmente por

$$G_{ij}^\sigma(\omega) \equiv \langle \langle c_{i\sigma}; c_{j\sigma}^\dagger \rangle \rangle, \quad (4.92)$$

e $f(\omega)$ é a função de distribuição de Fermi.

Como o Hamiltoniano efetivo de campo médio não possui termos de muitas partículas podemos obter as expressões exatas para as funções de Green. As funções de Green locais para os PQ's são dadas por.

$$G_{ii} = \frac{g_{ii}}{1 - g_{ii} \left(V_{i1} \tilde{g}_{11} \tilde{V}_{1i} + V_{i\bar{1}} \tilde{g}_{\bar{1}\bar{1}} \tilde{V}_{\bar{1}i} + V_{ij} g_{jj} \tilde{V}_{ji} \right)}, \quad (4.93)$$

onde

$$\tilde{V}_{ki} = V_{ki} + V_{kj} g_{jj} \tilde{V}_{ji}, \quad (k = \bar{1}, 1) \quad (4.94)$$

e

$$\tilde{V}_{ji} = \frac{V_{ji} + V_{j1} \tilde{g}_{11} V_{1i} + V_{j\bar{1}} g_{\bar{1}\bar{1}} V_{\bar{1}i}}{1 - g_{jj} V_{j1} \tilde{g}_{11} V_{1j} - g_{jj} V_{j\bar{1}} \tilde{g}_{\bar{1}\bar{1}} V_{\bar{1}j}}. \quad (4.95)$$

A função

$$\tilde{g}_{kk} = \frac{\omega - \sqrt{(\omega)^2 - 4t^2}}{2t^2}, \quad (k = \bar{1}, 1) \quad (4.96)$$

é a função de Green local do extremo de uma semicadeia⁴

Nas Eqs. (4.93), (4.94) e (4.95) i e j devem assumir os valores α e β sendo que se $i = \alpha$ então $j = \beta$ e vice-versa.

4.5.1 Condutância

As propriedades de transporte do sistema no equilíbrio termodinâmico são estudados através da condutância do sistema, que pode ser derivada do formalismo de Keldysh[81] e pode ser escrita como,

$$G = 4\pi^2 t^4 \rho_1(\epsilon_F) \rho_{\bar{1}}(\epsilon_F) |G_{\bar{1}1}(\epsilon_F)|^2. \quad (4.97)$$

A função $G_{\bar{1}1}$ pode ser escrita,

$$G_{\bar{1}1} = \tilde{g}_{\bar{1}\bar{1}} V_{\bar{1}\alpha} G_{\alpha 1} + \tilde{g}_{\bar{1}\bar{1}} V_{\bar{1}\beta} G_{\beta 1} = G_{\bar{1}1}^{(\alpha)} + G_{\bar{1}1}^{(\beta)}, \quad (4.98)$$

⁴Ver cálculo no apêndice C.

onde

$$G_{11}^{(i)} \equiv \tilde{g}_{11} V_{1i} G_{i1} = \tilde{g}_{11} V_{1i} G_{1i}^* \quad (i = \alpha, \beta) \quad (4.99)$$

é a contribuição do ramo i . $\rho_k(\omega) = (-1/\pi) \text{Im} \tilde{g}_{kk}(\omega)$ é a densidade de estados do sítio da semi-cadeia conectado com os pontos quânticos.

4.5.2

Resultados numéricos

A fim de calcular a condutância do sistema, resolvemos numericamente o sistema de equações (4.88-4.88n) autoconsistentemente.

Configuração em série:

Pode-se transformar o sistema da figura (4.1) numa configuração em série ao tomarmos $t_{\alpha 1} = t_{\beta 1} = 0$. Um sistema com uma configuração desse tipo foi estudado experimentalmente em [14]. Vamos considerar idênticas as duas semi-cadeias de modo que $\rho_1(\omega) = \rho_2(\omega) \equiv \rho_c(\omega)$. Por simplicidade vamos fazer $t_{\alpha 1} = t_{1\alpha} = t_{\beta 1} = t_{1\beta} = t'$ (real). No restante deste capítulo vamos tomar $\Gamma = \pi t'^2 \rho_c(\epsilon_F)$, a largura do pico na densidade de estados devido ao acoplamento com as cadeias, como unidade de energia, sendo ϵ_F o nível de Fermi ($\epsilon_F = 0$ em todo o capítulo). Os resultados serão todos para temperatura $T = 0$. Na Fig.4.2 mostramos a condutância para dois pontos quânticos acoplados em série, para vários valores de $\Delta\epsilon = \epsilon_\beta - \epsilon_\alpha$ e para $t_{\alpha\beta} = 1$. Para valores relativamente pequenos de $t_{\alpha\beta}$ o papel dessa interconexão entre os pontos quânticos é fornecer uma ponte entre eles por onde os elétrons podem passar. Aqui, a repulsão entre os níveis originais é essencialmente desprezível (dentro da largura dos níveis), e a condutância tem um máximo na condição de simetria partícula-buraco ($V_g = -U/2$). Para o caso degenerado, ($\Delta\epsilon = 0$, mesmo potencial de porta aplicado aos pontos quânticos), os pontos quânticos estão no regime Kondo. Nessa condição os níveis dos PQs $\epsilon_\alpha = \epsilon_\beta = -V_g/U$ estão abaixo do nível de Fermi e, portanto, estão ocupados com um elétron cada, produzindo o momento magnético localizado necessário para o efeito Kondo. Os picos na densidade de estados ao nível de Fermi fornecem uma condição de tunelamento ressonante com valor unitário (um quantum de condutância). Esse caso limite concorda bem com os resultados obtidos em [88]. À medida que $\Delta\epsilon$ cresce, os pontos quânticos chegam ao regime Kondo para valores de V_g ligeiramente diferentes e a condutância decresce. Valores maiores de $t_{\alpha\beta}$ resultam em uma considerável repulsão dos níveis e portanto dos picos na condutância. De fato, na figura 4.3 que mostra a condutância

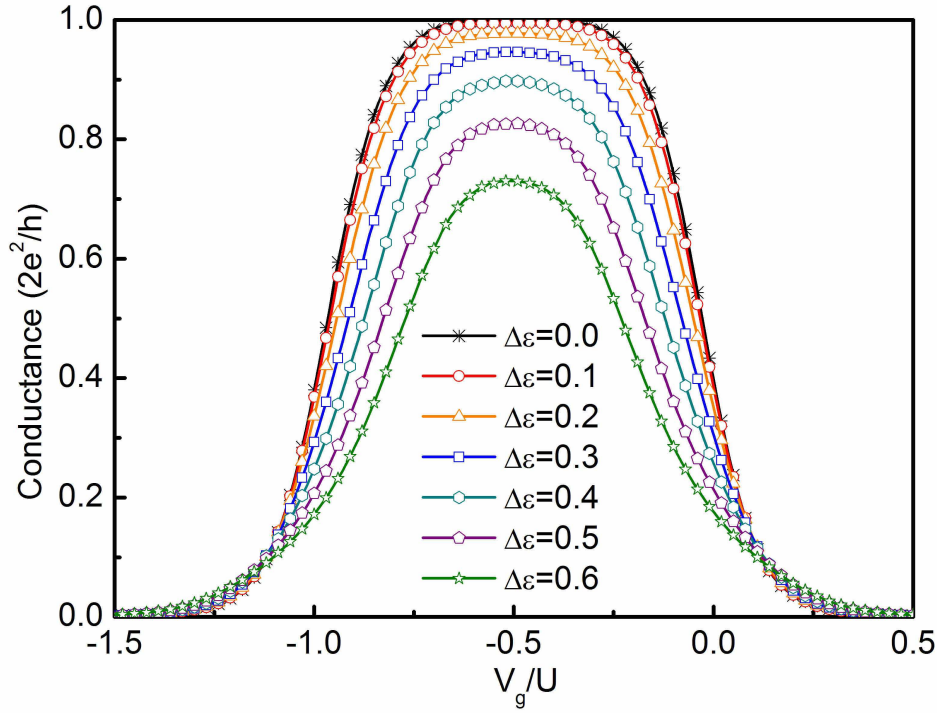


Figura 4.2: Condutância em função do potencial de porta V_g para vários valores de $\Delta\epsilon = \epsilon_\beta - \epsilon_\alpha$, para os QDs em série. A unidade de energia é Γ ; os parâmetros são $U = 12.5$ e $t_{\alpha\beta} = 1$.

em função do potencial de porta para diversos valores de $t_{\alpha\beta}$ vemos que no regime de simetria partícula-buraco ($V_g = -U/2$) a condutância tem um valor máximo para um dado valor de $t_{\alpha\beta}$. Na Fig. 4.4 fixamos o potencial de porta em $-U/2$ (simetria elétron-buraco, aqui $\Delta\epsilon = 0$) e mostamos a condutância em função de $t_{\alpha\beta}$. Observemos que o máximo da condutância ocorre para $t_{\alpha\beta} = \Gamma$. Nessa figura ainda comparamos os resultados obtidos com os métodos dos bosons escravos e do aglomerado embebido⁵. Vemos que ambos os resultados “fitam” bem com a expressão $(2\Gamma/t_{\alpha\beta})^2/[1 + (\Gamma/t_{\alpha\beta})^2]^2$ derivada por Antonine e Meir na Ref. [5]. Esse resultado sugere que esse comportamento independe do método utilizado, e, portanto da aproximação. É interessante, e até surpreendente, que o método dos bosons escravos na aproximação de campo médio reproduza muitos dos aspectos do efeito Kondo, que é intrinsecamente um problema de muitos corpos. De fato, na aproximação de campo médio flutuações de carga e de spin são desprezadas e portanto no regime em que essas quantidades variam muito com determinado parâmetro, os resultados não devem ser muito acurados. Isso pode ser visto na figura 4.3. Observe que as curvas têm maior concordância para valores de V_g em torno de

⁵Gostaríamos de agradecer ao Carlos Büsser que nos forneceu os resultados do método do aglomerado embebido.

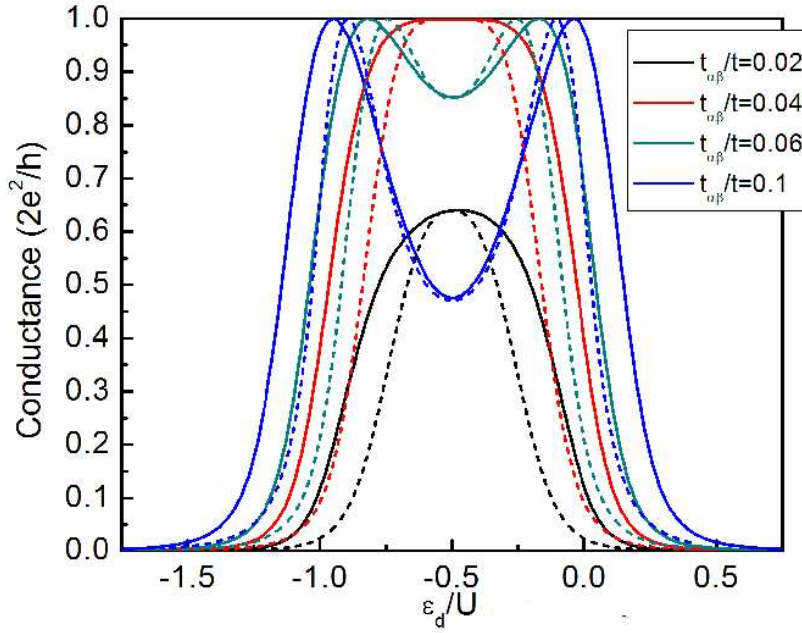


Figura 4.3: Condutância em função do potencial de porta V_g para $t_{\alpha\beta} = 0.02t < \Gamma$ (curva preta), $t_{\alpha\beta} = 0.04t = \Gamma$ (curva vermelha), $t_{\alpha\beta} = 0.06t > \Gamma$ (curva verde) e $t_{\alpha\beta} = 0.10t > \Gamma$ (curva azul) para os QDs em série e degenerados ($\Delta\epsilon = 0$). Os parâmetros são $U = 0.5t = 12.5\Gamma$ e $t' = 0.2t$. As linhas contínuas correspondem aos dados obtidos pelo método dos bosons escravos e as linhas tracejadas aos obtidos pelo método do aglomerado embebido.

$-U/2$. Na região onde V_g ou $V_g + U$ se aproxima do nível de Fermi observamos valores da condutância maiores quando calculados com os bosons escravos do que os obtidos pelo método do aglomerado embebido. Podemos atribuir essa discrepância às flutuações de carga que são consideráveis nessas condições de potencial de porta, e que são desprezadas na aproximação de campo médio. Portanto, nesse regime, acredita-se que o método do aglomerado embebido produz melhores resultados quando comparados com os bosons escravos.

Configuração em paralelo:

A associação em paralelo de dois pontos quânticos tem sido uma estrutura bastante estudada recentemente. Esta configuração é particularmente interessante pois constitui uma estrutura adequada para estudar efeitos de interferências devido à propagação coerente por diferentes trajetórias. Como veremos adiante, essa interferência tem grande efeito na condutância do sistema.

A Fig.4.5 mostra a condutância como função do potencial de porta para

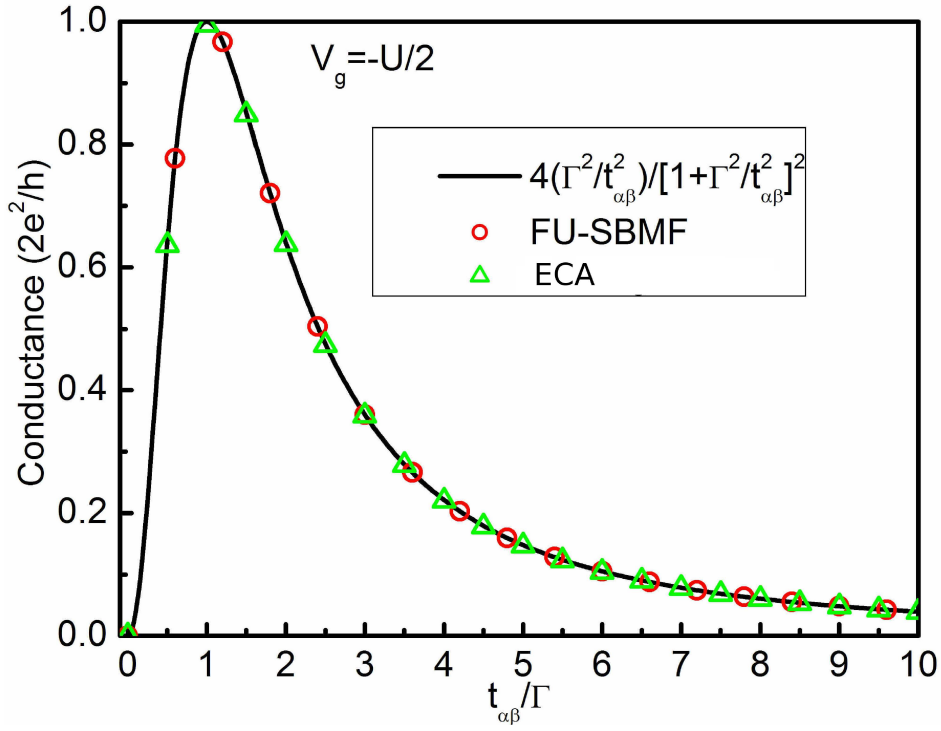


Figura 4.4: Condutância em função do acoplamento inter-dot, $t_{\alpha\beta}$, para os PQs em série e degenerados ($\Delta\epsilon = 0$). Os parâmetros são $U = 12.5\Gamma$. A linha contínua é a função $(2\Gamma/t_{\alpha\beta})^2/[1 + (\Gamma/t_{\alpha\beta})^2]^2$ (veja Ref. [5]), os círculos ($\circ$) são os resultados obtidos com bosons escravos e os triângulos ($\triangle$) com o método do aglomerado embebido.

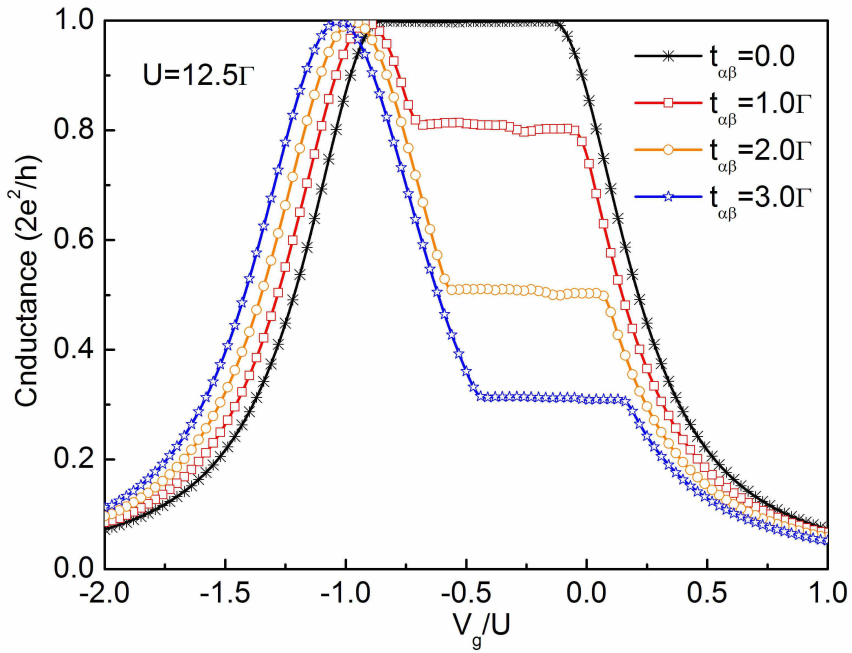


Figura 4.5: Condutância em função do potencial de porta V_g para vários valores de $t_{\alpha\beta}$, para os QDs em paralelo e degenerados ($\Delta\epsilon = 0$). Os parâmetros são $U = 12.5\Gamma$ e $t' = 0.25t$.

uma configuração em paralelo para $\Delta\epsilon = 0$ e diferentes valores de $t_{\alpha\beta}$. Note que essa configuração assemelha-se àquela usada na Ref.[93] para estudar corrente persistente de um PQ acoplado lateralmente a um anel. Nesse caso, no entanto, existem dois PQ's, cada um embebido em um dos ramos do anel e os resultados são muitos semelhantes aos encontrados na Ref. [94]. Para os dados mostrados na Fig.(4.5), escolhemos $U = 12.5\Gamma$ e $t_{\beta 1} = t_{\beta \bar{1}} = t_{\alpha 1} = t_{\alpha \bar{1}} = t' = 0.25t$. Para $t_{\alpha\beta} = 0$, notamos o típico valor unitário limite para a condutância na região em torno de $V_g = -U/2$. Nesse caso temos os dois PQ's no regime Kondo. O caso de meia ocupação resulta em uma projeção de spin total $S = 1$, fornecida pelos dois elétrons (um em cada ponto quântico). Pode-se distinguir dois regimes bem definidos nas curvas da condutância. O platô original em torno de $V_g = -U/2$ para $t_{\alpha\beta} = 0$ se desdobra em duas regiões para valores finitos do acoplamento $t_{\alpha\beta}$. Vamos analisar esse comportamento em detalhe.

À medida que $t_{\alpha\beta}$ cresce, surgem misturas de níveis e repulsões, criando estados *ligantes* e *anti-ligantes* no sistema. Essa mistura coerente de estados criados entre os dois pontos quânticos são estados com configurações anti-simétricas e simétricas, respectivamente, resultando em diferentes acoplamentos efetivos com os reservatórios. O estado anti-simétrico, por exemplo, contribui na densidade de estados com um pico muito estreito do tipo *delta* (veja Fig. 4.6) e não está diretamente acoplado aos reservatórios. Esse fenômeno se assemelha ao caso dos estados “subradiantes” discutidos no contexto de unidades radiantes acopladas, enquanto que aqui é mais natural chamá-los de “subtunelantes” [95, 96]. Para verificar como isso ocorre vamos analisar o que acontece com os estados simétrico e antissimétrico no Hamiltoniano original. Para tanto vamos fazer a transformação de simetria

$$c_{S\sigma} = \frac{1}{\sqrt{2}}(c_{\alpha\sigma} + c_{\beta\sigma}) \quad (4.100a)$$

$$c_{A\sigma} = \frac{1}{\sqrt{2}}(c_{\alpha\sigma} - c_{\beta\sigma}). \quad (4.100b)$$

Sendo os estados localizados degenerados ($\epsilon_\alpha = \epsilon_\beta = \epsilon_d$), pode-se reescrever o Hamiltoniano (4.82) com esses novos operadores e obtemos,

$$\begin{aligned} H = & \sum_{\substack{i=S,A \\ \sigma}} \epsilon_i c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma} + \sqrt{2}t_{\alpha\beta} \sum_{k\sigma} \left(c_{S\sigma}^\dagger c_{k\sigma} + c_{k\sigma}^\dagger c_{S\sigma} \right) + \frac{U}{4} \sum_{\substack{i=S,A \\ \sigma}} n_{i\sigma} n_{i\bar{\sigma}} \\ & + \frac{U}{2} \sum_{\sigma} n_{S\sigma} n_{A\bar{\sigma}} + \frac{U}{4} \left(c_{S\uparrow}^\dagger c_{A\uparrow} c_{S\downarrow}^\dagger c_{A\downarrow} + c_{A\uparrow}^\dagger c_{S\uparrow} c_{A\downarrow}^\dagger c_{S\downarrow} \right) \\ & - \frac{U}{2} (S_S^+ S_A^- + S_A^+ S_S^-), \end{aligned} \quad (4.101)$$

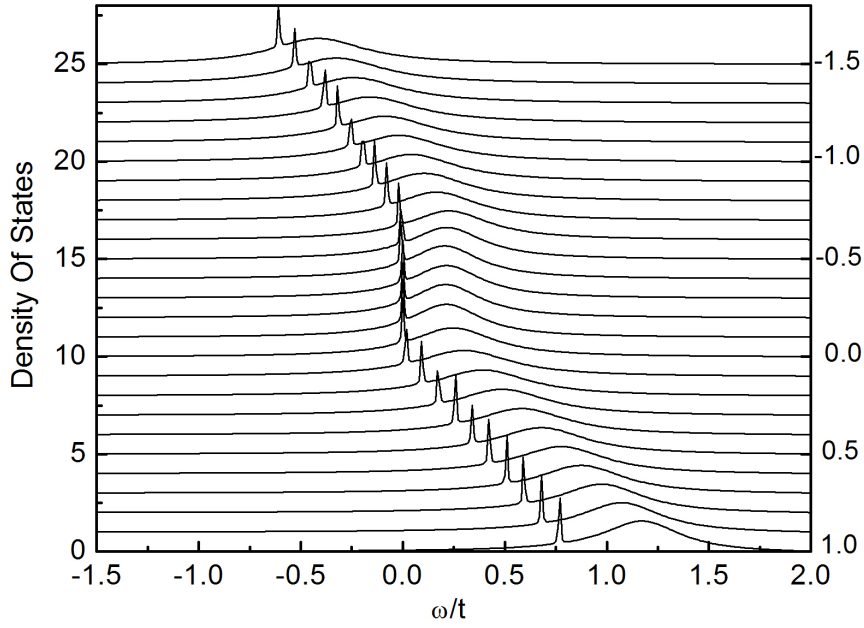


Figura 4.6: Densidade de estados (eixo da esquerda) como função da energia ω para uma configuração em paralelo. Ao longo do eixo da direita estão indicados os diversos valores de V_g/U das diferentes curvas (deslocadas verticalmente). Mesmos parâmetros da Fig. 4.5 com $t_{\alpha\beta} = 2\Gamma$.

onde $\epsilon_S = \epsilon_d + t_{\alpha\beta}$ e $\epsilon_A = \epsilon_d - t_{\alpha\beta}$. Os operadores $S_i^+ = c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\downarrow}$ e $S_i^- = c_{i\downarrow}^\dagger c_{i\uparrow}$ são os operadores de inversão de spin. Note na expressão acima que o estado simétrico (S) com energia $\epsilon_d + t_{\alpha\beta}$ está acoplado aos reservatórios com um acoplamento $\sqrt{2}t_{\alpha\beta}$, que é mais forte do que o acoplamento dos sítios originais α e β . Por outro lado o estado antissimétrico (A), com energia $\epsilon_d - t_{\alpha\beta}$ não está acoplado diretamente com os reservatórios. No entanto, os termos de interação U no Hamiltoniano original dão origem a termos mais complexos como pode ser visto na expressão acima. O terceiro termo no Hamiltoniano acima representa uma interação coulombiana entre elétrons no mesmo nível (A e S), o quarto refere-se a uma interação entre elétrons residindo em diferentes níveis, o quinto representa um tunelamento simultâneo de 2 elétrons de um nível para outro, atravessando uma barreira de potencial $U/4$. Finalmente o último termo representa uma interação de troca de spin entre os níveis com um acoplamento efetivo $J = -U/2$. Note ainda que embora o nível A não esteja acoplado diretamente com os reservatórios, ele depende do estado de carga e de spin do nível S, que por sua vez está acoplado com os reservatórios. Fazendo essa transformação no Hamiltoniano bosonizado, o estado antissimétrico dependerá do estado de carga do estado simétrico por intermédio dos bósons escravos. É essa complicada dependência que faz com que o nível A fique preso perto do

nível de Fermi para uma larga faixa de potencial de porta, como mostra a figura 4.6. As contribuições para a condutância, são essencialmente provenientes do estado simétrico. O estado simétrico tem um forte acoplamento com os reservatórios, assim como os estados “super radiantes”, e portanto o chamamos de estados “super tunelantes” [95, 96]. Os estados supertunelantes resultam nos picos largos na densidade de estados, como visto na Fig. 4.6 para energias mais altas.

Voltando à Fig. 4.5, na região plana apresentada para $t_{\alpha\beta} \neq 0$, o estado anti-simétrico está fixo perto do nível de Fermi para uma grande faixa de valores do potencial de porta, como podemos ver na figura 4.6. Nesse regime, a contribuição para a condutância vem da cauda do estado simétrico que está um pouco acima do nível de Fermi. Uma vez que o estado simétrico não está ressonante com o nível de Fermi, a condutância não chega à unidade, até que o estado antiligante desloca-se para baixo do nível de Fermi. Note que a diferença de energia entre os estados simétrico e anti-simétrico está determinado por $t_{\alpha\beta}$, portanto, se o estado A estiver no nível de Fermi, um aumento em $t_{\alpha\beta}$ provoca um deslocamento no estado S para além do nível de Fermi, fazendo com que a condutância diminua.

É interessante notar que, aparentemente, o estado anti-simétrico está em Kondo, o que é bastante estranho, pois este não se acopla com os reservatórios. Por outro lado, a carga do estado antissimétrico é uma mistura de cargas n_α e n_β . Estando esses estados parcialmente ocupados eles estarão em Kondo (para pequenos valores de $t_{\alpha\beta}$), esse efeito Kondo é refletido pelo estado simétrico, quando este está preso ao nível de Fermi. Podemos interpretar a supressão no platô da condutância da seguinte maneira: para $t_{\alpha\beta} = 0$ temos os dois pontos quânticos em Kondo, com spin total $S = 1$. Valores finitos $t_{\alpha\beta}$ favorecem um acoplamento antiferromagnético entre os PQ α e β , como o efeito Kondo favorece um alinhamento de spins nos PQ, existe portanto uma competição entre esses dois efeitos. Isso pode ser notado com a diminuição da largura do platô na Fig. 4.5, à medida que $t_{\alpha\beta}$ aumenta.

Quebrando a degenerescência entre os PQ, $\Delta\epsilon \neq 0$ e $t_{\alpha\beta} = 0$, a condutância do sistema muda significativamente. A condutância para caso não degenerado é mostrado na Fig. 4.7. Nesse caso escolhemos $t' = 0.1t$ e $\Delta\epsilon = 7,5\Gamma$, de modo a termos uma separação significativa entre os níveis. Obtemos um estrutura de três picos, análogos àqueles obtidos em trabalhos anteriores [89, 90], onde foi aplicado o método ECA para estudar o regime Kondo. Os três picos podem ser entendidos como: o pico perto de $V_g = 0$ é devido aos elétrons atravessando pelo PQ α . Nessa situação temos $\epsilon_\alpha < \epsilon_F$ e $\epsilon_\alpha + U, \epsilon_\beta > \epsilon_F$, de modo que apenas o PQ α possui um único elétron, portanto

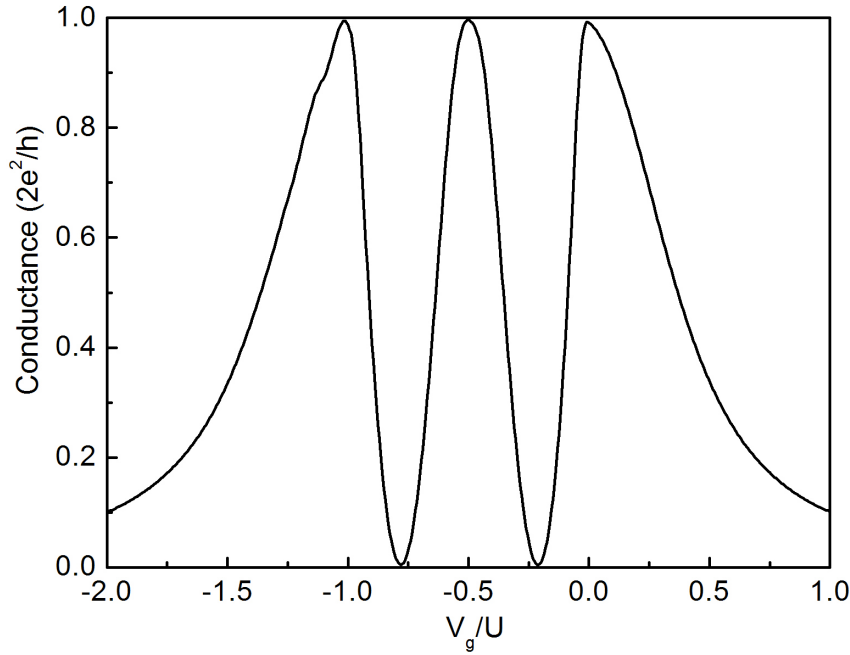


Figura 4.7: Condutância para uma configuração em paralelo para o caso não degenerado. Os parâmetros são $U = 12.5\Gamma$, $\Delta\epsilon = 0.075\Gamma$, $t' = 0.1t$ e $t_{\alpha\beta} = 0$.

temos $S=1/2$. À medida que os níveis se deslocam com o potencial de porta, o nível β com energia $V_g + \Delta\epsilon/2$, se torna acessível e a condutância começa e decrescer devido a uma interferência destrutiva de elétrons atravessando em diferentes ramos, e anulando-se completamente para $V_g \sim -0.2U$. O pico na posição de simetria partícula-buraco ($V_g/U = -0.5$) chega a unidade quando os dois pontos quânticos estão no regime Kondo, isto é $\epsilon_\alpha, \epsilon_\beta < \epsilon_F$ e $\epsilon_\alpha + U, \epsilon_\beta + U > \epsilon_F$. Estando ambos os PQs em Kondo, o elétron de cada PQ está correlacionado antiferromagneticamente com os elétrons de condução. Nesse caso a única possibilidade é que eles tenham o mesmo spin, portanto temos $S=1$. O vale seguinte tem uma interpretação similar ao primeiro (nesse caso o nível α está completamente cheio). Finalmente, no último pico (em $V_g \sim -0.8U$) o nível ϵ_α está muito abaixo do nível de Fermi e a contribuição vem do ponto quântico β que está no regime Kondo, com $S=1/2$.