

5

Interação elétron-fônon e efeito Kondo com carga não inteira

Até aqui estudamos os efeitos combinados das interações EE e EF no regime de bloqueamento de Coulomb. O efeito Kondo em pontos quânticos por sua vez foi estudado na ausência da interação EF. Existem poucos estudos desenvolvidos que focalizam o efeito da interação EF no regime Kondo de um sistema físico. Isto se deve em parte à grande dificuldade em tratar esta situação. Esta dificuldade é ainda maior quando a região localizada deve ser descrita por mais de um estado local. Entretanto, achamos de grande interesse teórico o estudo do efeito Kondo num sistema de um ponto quântico com dois níveis de energia sintonizado na vizinhança de um desdobramento de Rabi. Como é sabido, o efeito Kondo está associado à existência de um estado altamente confinado e ocupado por elétrons com um saldo de spin diferente de zero, na presença de interação coulombiana forte, de forma que este spin se correlaciona anti-ferromagneticamente com os spins dos elétrons de condução. Este regime Kondo, diferentemente do regime de transição de valência de carga não inteira e flutuante, possui propriedades derivadas do estado fundamental do sistema de carga inteira com flutuação zero. As flutuações associadas a este regime estão restritas ao setor de spin do sistema. Esta descrição do efeito Kondo surge de uma visão segundo a qual cada estado pode ser ocupado por um valor inteiro de carga, já que ele é um objeto essencialmente de um corpo. Entretanto, como já foi analisado no capítulo anterior, o efeito Rabi produz um desdobramento dos níveis de muitos corpos, produzindo um fracionamento da carga máxima que cada um destes subníveis pode receber. Como consequência, no caso de um destes subníveis estiver por baixo do nível de Fermi e o outro por cima, teremos a possibilidade de que o spin da fração de elétron ocupando o estado de muitos corpos por baixo do nível de Fermi se acople antiferromagneticamente com os spins de condução, dando origem a um efeito Kondo de carga não inteira. Este regime peculiar tem propriedades especiais típicas desta situação e em princípio diferentes daquelas conhecidas para o efeito Kondo tradicional. É nosso propósito, neste capítulo, estudar esta situação resultando da conjugação das interações EE e EF. Este problema será

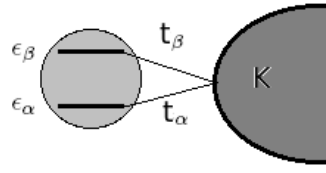


Figura 5.1: Representação esquemática de um ponto quântico com dois níveis acoplados a elétrons de condução.

analisado usando as técnicas das equações de movimento para as funções de Green. Este é um problema difícil já que, incorporando as duas interações, a hierarquia das equações que resultam são de uma extrema complexidade. Com o objetivo de resolver este problema, utilizaremos a experiência obtida no desenvolvimento dos capítulos anteriores. Para simplificar o formalismo iremos supor que a correlação coulombiana intra-nível seja infinita, suposição que é compatível com a física do efeito Kondo e do desdobramento de Rabi, os ingredientes essenciais dos estudo que propomos desenvolver. Neste limite a função de Green toma uma forma bastante simples, como aparece na Eq. (2.44). Essa forma simples sugere que seja possível encontrar também uma forma relativamente simples para um sistema com interações EE e EF atuando simultaneamente, no limite $U \rightarrow \infty$.

5.1

Ponto quântico de dois níveis

Consideremos um sistema constituído de um ponto quântico de dois níveis acoplado a um reservatório de elétrons de condução através de contatos metálicos. O sistema está representado na figura 5.1. Os níveis estão acoplados ao reservatório em princípio com diferentes constantes. O sistema pode ser descrito pelo Hamiltoniano

$$H = H_0 + H_D + H_I, \quad (5.1)$$

onde

$$H_0 = \sum_{k\sigma} \epsilon_k c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma}, \quad (5.2)$$

descreve os elétrons de condução no reservatório, sendo $c_{k\sigma}^\dagger$ ($c_{k\sigma}$) o operador que cria (aniquila) um elétron com energia ϵ_k e projeção de spin σ , $H_D =$

$H_{el} + H_{ph} + H_{el-ph}$, sendo

$$H_{el} = \sum_{\substack{i=\alpha,\beta \\ \sigma}} \epsilon_i c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma} + \sum_{\substack{ij=\alpha\beta \\ \sigma\sigma'}} U_{ij}^{\sigma\sigma'} n_{i\sigma} n_{j\sigma'}, \quad (5.3)$$

onde $c_{i\sigma}^\dagger$ ($c_{i\sigma}$) cria (aniquila) um elétron no i -ésimo nível no PQ com projeção de spin σ e energia $\epsilon_i = \epsilon_i^0 - eV_g$ (V_g é o potencial de porta e controla o número de elétrons dentro do PQ). O primeiro termo refere à energia diagonal. O segundo descreve a interação coulombiana intra e inter-nível local $U_{ij}^{\sigma\sigma'}$. O Hamiltoniano dos fônons pode ser escrito como,

$$H_{ph} = (b^\dagger b + 1/2)\hbar\omega_0, \quad (5.4)$$

onde b^\dagger (b) cria (aniquila) um fônon com frequência ω_0 e

$$H_{el-ph} = \lambda \sum_{\sigma} (b^\dagger c_{\alpha\sigma}^\dagger c_{\beta\sigma} + h.c.) \quad (5.5)$$

descreve o acoplamento EF na aproximação da onda rotante (RWA) (veja Cap. 3), sendo λ a intensidade desse acoplamento. A forma dessa interação é formalmente similar à estudada no capítulo 3 e nas Ref. [56] e [92], no contexto de moléculas diatômicas. Finalmente,

$$H_I = \sum_{\substack{i=\alpha,\beta \\ k\sigma}} t_i (c_{i\sigma}^\dagger c_{k\sigma} + h.c.) \quad (5.6)$$

estabelece o acoplamento entre elétrons localizados no PQ e itinerantes no reservatório através do elemento de matriz t_i considerado como sendo independente de k .

A interação coulombiana difere do modelo de Anderson original, uma vez que vamos supor que U dependa das projeções de spin dos elétrons envolvidos. Por simplicidade vamos também considerar que além de uma repulsão coulombiana infinita entre elétrons situados no mesmo nível no PQ ($U_{\alpha\alpha}^{\sigma\bar{\sigma}} = U_{\beta\beta}^{\sigma\bar{\sigma}} = \infty$). Consideraremos também que elétrons situados em níveis diferentes mas com as mesmas projeções de spin não interajam entre si, isto é, $U_{\beta\alpha}^{\sigma\sigma} = 0$, mas aqueles de diferentes projeções de spin o façam com uma interação infinita¹, $U_{\alpha\beta}^{\sigma\bar{\sigma}} = U_{\beta\alpha}^{\bar{\sigma}\sigma} = \infty$. Esta aproximação não é crucial para os resultados apresentados aqui. A escolha simplifica os cálculos e favorece

¹Esta ultima suposição é adotada com o propósito de impor a regra de Hund no ponto quântico favorecendo energeticamente a configuração de $S = 1$ quando ele possua dois elétrons. Esta suposição além de representar uma possível situação real, dá garantia de que o ponto quântico com dois elétrons pode estar acoplado em Kondo com os elétrons de condução através dos contatos, por corresponder um estado de $S = 1$.

energeticamente a correlação ferromagnética no PQ, de forma a poder supor, sem sombra de dúvida, que o estado fundamental seja de $S = 1$ e que, como consequência, o sistema possua um estado fundamental Kondo. O efeito Kondo para um sistema de dois níveis seria incompatível com uma correlação antiferromagnética que criará um estado fundamental de $S = 0$.

5.1.1 Auto-energias

A fim de obter a função de Green local no PQ, vamos lançar mão de alguns resultados que obtivemos nos capítulos anteriores. Na ausência de interação EF e na aproximação atômica, a função de Green do nível i pode ser escrita como,

$$g_{ii}^{\sigma}(\omega) = \frac{P_{ij\sigma}}{\omega - \epsilon_i}, \quad (5.7)$$

onde

$$\begin{aligned} P_{ij\sigma} &= \langle (1 - n_{i\bar{\sigma}})(1 - n_{j\bar{\sigma}})(1 - n_{j\sigma}) \rangle \\ &= 1 - \langle n_{i\bar{\sigma}} \rangle - \langle n_{j\sigma} \rangle - \langle n_{j\bar{\sigma}} \rangle + \langle n_{i\bar{\sigma}} n_{j\bar{\sigma}} \rangle, \quad (i \neq j). \end{aligned} \quad (5.8)$$

Na última linha da expressão acima fizemos $\langle n_{i\bar{\sigma}} n_{j\sigma} n_{j\bar{\sigma}} \rangle = 0$ e também $\langle n_{j\sigma} n_{j\bar{\sigma}} \rangle = \langle n_{i\sigma} n_{j\bar{\sigma}} \rangle = 0$, uma vez que dois elétrons não podem ocupar o mesmo nível e níveis diferentes com spins opostos. O efeito da interação EF e do acoplamento com os reservatórios será incorporado através das auto-energias. Com base na Eq. (2.44) o efeito do acoplamento com o reservatório é dado pela autoenergia,

$$\Sigma_{i\sigma}^{(el)}(\omega) = \frac{t_i^2 \sum_k \frac{1+f(\epsilon_k)}{\omega - \epsilon_k}}{1 - t_j^2 \sum_k \frac{1+f(\epsilon_k)}{\omega - \epsilon_k}}, \quad (5.9)$$

onde $f(x)$ é a função de distribuição de Fermi. Essa auto-energia leva em conta o efeito da interação indireta entre os dois níveis por intermédio do reservatório. O efeito da interação EF por sua vez pode ser obtido tomando o limite $U \rightarrow \infty$ na Eq. (3.31) e (3.35). Podemos escrever,

$$\Sigma_{i(j)\sigma}^{(ph)}(\omega) = \frac{\lambda^2 A_{i(j)}}{\omega - \epsilon_{j(i)} \pm \hbar\omega_0 + t_{j(i)}^2 \sum_k \frac{1+f(\epsilon_k)}{\omega - \epsilon_k \pm \hbar\omega_0}} \quad (5.10)$$

onde

$$A_{\alpha} = (\langle b^{\dagger} b \rangle + n_{\beta\sigma}) [1 - n_{\beta\sigma}] \quad (5.11)$$

e

$$A_\beta = (\langle b^\dagger b \rangle + 1 - n_{\alpha\sigma})[1 - n_{\alpha\sigma}]. \quad (5.12)$$

Os sinais + e - no denominador da Eq. (5.10) referem aos sub-índices α e β respectivamente. Assim as funções de Green podem ser escritas como:

$$G_{ii}^\sigma(\omega) = \frac{P_{i\sigma}}{\omega - \epsilon_i - \Sigma_{i\sigma}^{(el)}(\omega) - \Sigma_{i\sigma}^{(ph)}(\omega)}. \quad (5.13)$$

Os valores esperados na Eq. (5.8) são calculados integrando auto-consistentemente a parte imaginária das funções de Green. A carga é calculada por:

$$\langle n_{i\sigma} \rangle = \frac{-1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \text{Im} G_{ii}^\sigma(\omega) f(\omega) d\omega. \quad (5.14)$$

Para se obter uma expressão para $\langle n_{2\sigma} n_{1\sigma} \rangle$ vamos incorporar as interações através das auto-energias. Podemos escrever²

$$\begin{aligned} \langle n_{2\sigma} n_{1\sigma} \rangle &= -\frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \text{Im} \frac{\langle n_{2\sigma} \rangle}{\omega - \epsilon_1 - \Sigma^{(el)}(\omega) - \Sigma^{(ph)}(\omega)} \\ &= \frac{-1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \text{Im} [\langle n_{2\sigma} \rangle G_{11}^\sigma(\omega) / P_{1\sigma}] f(\omega) d\omega. \end{aligned} \quad (5.15)$$

Os efeitos das interações EE e EF, bem como o efeito Kondo se manifestam na densidade de estados do sistema, como temos visto nos capítulos anteriores. Aqui vamos analisar como o efeito Kondo é modificado pela interação EF. Para tanto devemos graficar a densidade de estados $\rho^\sigma(\omega) = \rho_\alpha^\sigma(\omega) + \rho_\beta^\sigma(\omega)$ onde,

$$\rho_i^\sigma(\omega) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} G_{ii}^\sigma(\omega) \quad (5.16)$$

Por uma questão de simplicidade vamos supor o caso não magnético ($\langle n_{i\bar{\sigma}} \rangle = \langle n_{i\sigma} \rangle$) e os elétrons de condução serão representados por uma densidade de estados constante dada pela Eq. (2.22). Note que nesse caso teremos duas temperaturas Kondo diferentes associadas a cada nível. Elas são dadas por $T_K^{(i)} = \sqrt{D\Gamma_i} e^{\pi(\epsilon_i - \epsilon_F)/2\Gamma_i}$, onde $\Gamma_i = \pi t_i^2 / (2D)$ é o alargamento do i -ésimo nível e ϵ_F é o nível de Fermi (veja seção 2.2.2).

Uma análise cuidadosa revela que os efeitos da interação EF é mais pronunciada quando $\hbar\omega_0 = \Delta\epsilon = \epsilon_\beta - \epsilon_\alpha$, que é a condição de ressonância para emissão e absorção de fônons no presente caso. Esse é o regime de desdobramento de Rabi descrito no capítulo 3, no atual contexto.

²Uma discussão sobre a dedução dessa expressão está mostrada no apêndice D.

Analogamente ao caso daquele capítulo, os níveis locais se desdobram nessas condições. A distância dos níveis desdobrados é proporcional a λ .

5.1.2 Resultados

A fim de analisar o que acontece com a combinação dos regimes de Kondo e desdobramento Rabi, vamos escolher os valores dos parâmetros de modo que o desdobramento de Rabi esteja próximo do nível de Fermi e do pico Kondo. Esta seria a situação mais propícia para criar a condição de regime Kondo de carga não inteira mencionado na introdução deste capítulo. Doravante vamos tomar $\Gamma = \Gamma_\beta$ como a unidade de energia. Nessa unidade, fixamos $\Delta\epsilon = \epsilon_\beta - \epsilon_\alpha = 10.0$, $\lambda = 5.0$ e $D \approx 10^3$. Esses valores foram escolhidos de acordo com os utilizados na Ref. [59], baseado num sistema realista de *InAs*, onde foi considerado $\lambda = 0.2\Delta\epsilon$ (com $\Delta\epsilon \approx 35meV$). No presente trabalho, a escolha de $\lambda = 0.5\Delta\epsilon$ é relativamente grande, a fim de que o fenômeno seja mais evidente. Vamos também supor $\Gamma_\beta = 100\Gamma_\alpha$. Com isso, sendo Γ_α muito pequeno e ϵ_α estando muito por baixo do nível de Fermi, a temperatura Kondo do nível α é praticamente nula, de modo que o efeito Kondo nesse pico não é observado. O valor da largura da banda de condução $2D \approx 2 \times 10^3$ é essencialmente irrelevante para os resultados obtidos. Primeiramente vamos tomar $\epsilon_\alpha = -15.0$ e $\epsilon_\beta = -5.0$ e $\hbar\omega_0 = 10.0$. Desta forma, de acordo com a Eq. (2.54), a temperatura Kondo $T_k^{(\beta)} \approx 0.027$ e $T_K^{(\alpha)} \sim 0$, podemos portanto fixar a temperatura do sistema em $T = 0.005$, menor do que $T_K^{(\beta)}$ e muito maior do que $T_K^{(\alpha)}$. Isso garante as condições necessárias para que a manifestação do efeito Kondo esteja associada ao nível β quase que exclusivamente. A natureza da física que surge quando os dois níveis passam a contribuir é de maior complexidade conceitual e será estudado posteriormente a esta tese, como um desdobramento dela.

A figura 5.2 mostra a densidade de estados para o PQ (curva vermelha) individualmente para cada estado (curvas preta e azul). Note que o pico próximo a ϵ_β está desdobrado devido a interação EF. Pela Eq. (5.13), a posição dos picos na densidade de estados do nível β é dado pela solução da equação $\text{Re}[\omega - \epsilon_\beta - \Sigma_\beta^{(el)}(\omega) - \Sigma_\beta^{(ph)}(\omega)] = 0$. Na condição de ressonância, $\Delta\epsilon = \hbar\omega_0$, temos duas soluções, $\epsilon_\beta^\pm \sim \epsilon_\beta \pm \lambda\sqrt{A_\beta}$. Os picos podem ser visto na Fig. 5.5. Nessa situação o nível ϵ_α está bem abaixo no nível de Fermi, ϵ_F . A largura do pico centrado em ϵ_α é essencialmente devido ao contato com os elétrons de condução, por intermédio da interação EF. O nível ϵ_β por sua vez está abaixo do nível de Fermi, mas não tanto quanto ϵ_α . Observe o pico Kondo no nível de Fermi. Na Fig. 5.3 está mostrada as cargas nos níveis e a correlação $\langle n_{\alpha\sigma}n_{\beta\sigma} \rangle$

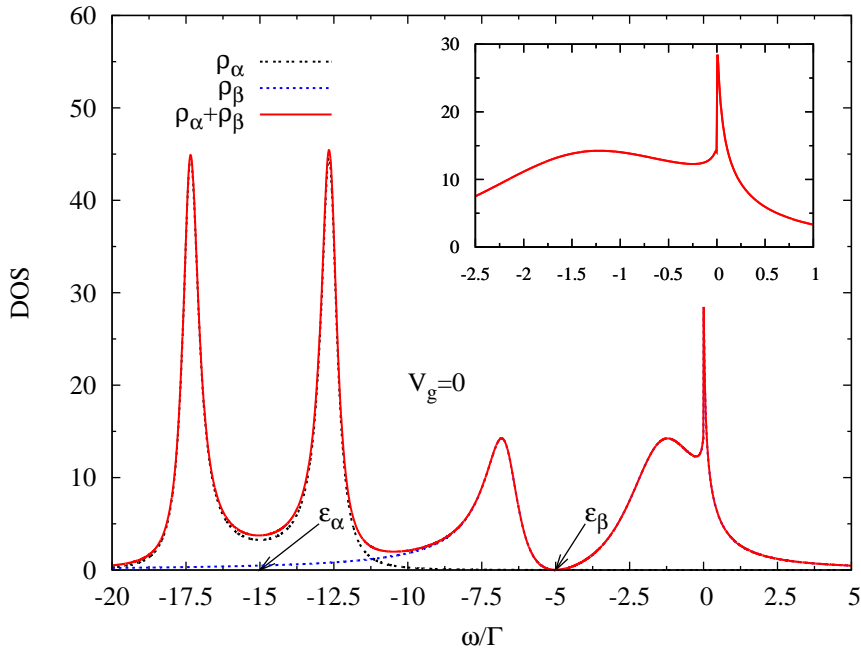


Figura 5.2: Densidade de estados em função da energia no regime Kondo. Em unidades de Γ , os valores dos parâmetros são: $V_g = 0$ níveis ϵ_α e ϵ_β são -15.0 e -5.0 respectivamente. A temperatura é $T = 0.005$. Na janela dentro da figura mostramos uma ampliação do pico Kondo. As diversas curvas estão identificadas na legenda dentro da figura.

em função do potencial de porta, V_g . Note que para $V_g = 0$, as cargas por spin nos níveis α e β são aproximadamente 0.5 e 0.35 , respectivamente.

É importante observar que $\langle n_{\beta\sigma} \rangle$ como função de V_g apresenta dois platôs. Aquele que corresponde a $\langle n_{\beta\sigma} \rangle \approx 0.05$ para $2 < V_g < 5.0$ corresponde à região na qual o sistema pode se encontrar num regime Kondo de carga não inteira.

A situação fica mais interessante quando aplicamos um potencial de porta V_g a fim de deslocar os níveis para cima, em direção ao nível de Fermi. A Fig. 5.5 mostra a densidade de estados para $V_g = 6.0$. Nesse caso, $\epsilon_\alpha = -9.0$ está ainda por baixo no nível de Fermi, ϵ_F , e quase que completamente ocupado. O nível $\epsilon_\beta = 1.0$, no entanto, está um pouco acima de ϵ_F mas como se encontra desdobrado pela interação EF, um dos sub-picos se localiza abaixo de ϵ_F (veja esquema na figura 5.4).

Observe que nesse caso a carga no nível β é $\langle n_{\beta\sigma} \rangle \approx 0.1$, que está longe do regime unitário. É interessante notar a ressonância proveniente do pico desdobrado abaixo do nível de Fermi. Nesse caso o que se observa é um efeito Kondo com carga não inteira, uma vez que o nível β não está completamente cheio. Note entretanto que, embora o nível esteja parcialmente cheio, ele não se encontra no regime de flutuação de valência. Essa situação é caracterizada por um platô no gráfico da carga do nível β (Fig. 5.3), para uma faixa de potencial de porta $2 < V_g < 5.0$. O sistema está, neste caso, no “regime

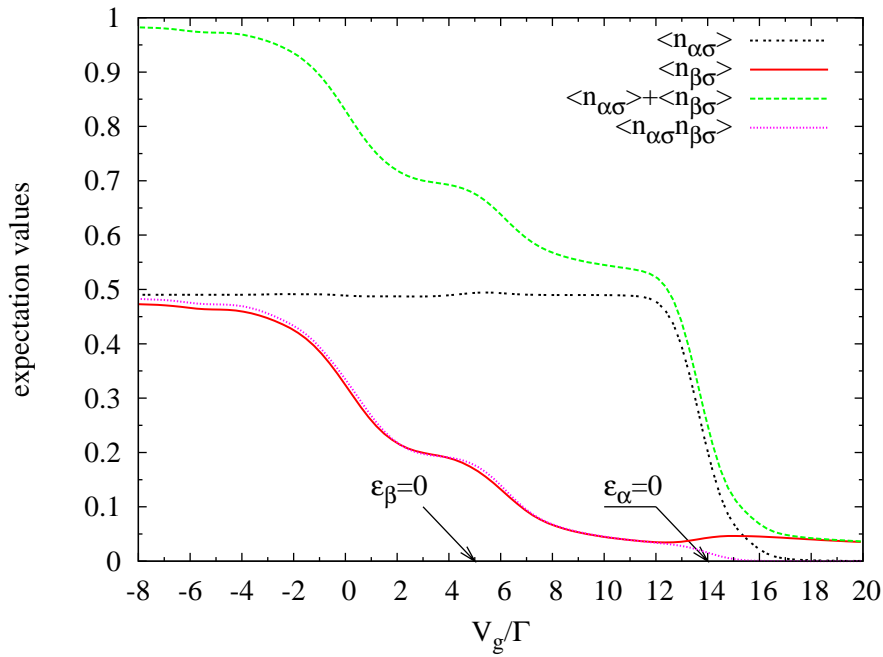


Figura 5.3: Valores esperados por spin em função do potencial de porta V_g . Em unidades de Γ , os valores dos parâmetros são $T = 0.001$ e as posições originais dos níveis são $\epsilon_{\alpha}^0 = -15.0$ e $\epsilon_{\beta}^0 = -5.0$. As diversas curvas estão identificadas na legenda dentro da figura

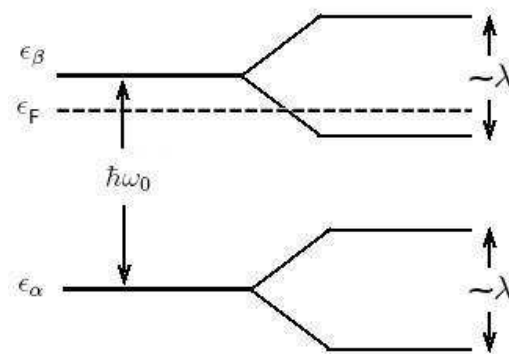


Figura 5.4: Esquema representando a posição nos níveis em relação ao nível de Fermi para o regime Kondo de carga não inteira.

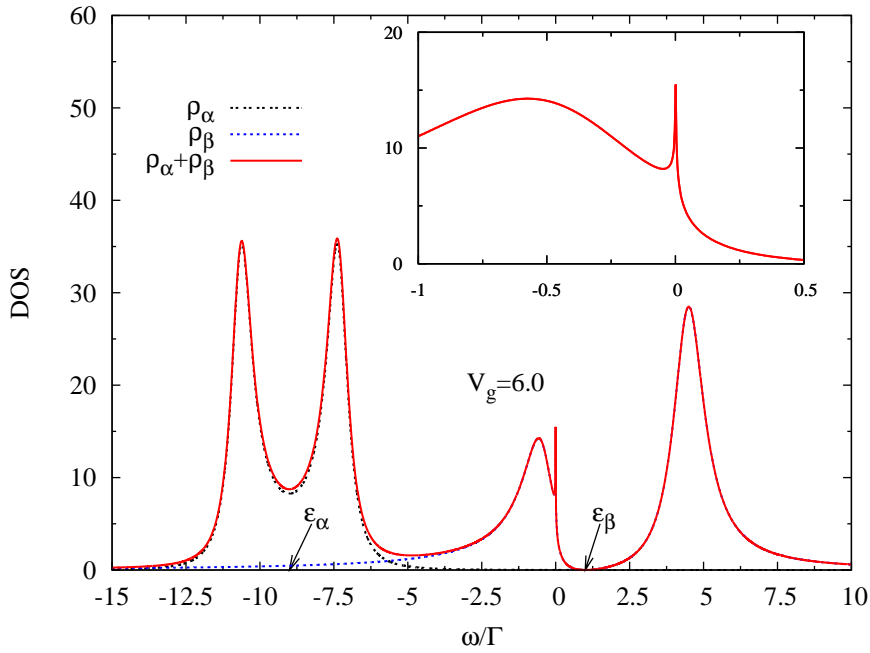


Figura 5.5: Densidade de estados em função da energia. Para $V_g = 6.0$ os níveis ϵ_α e ϵ_β tem valores -9.0 e 1.0 respectivamente. A identificação das diversas curvas está mostrada na figura. Na janela do gráfico está mostrada uma ampliação do pico Kondo. As energias são dadas em unidades de Γ

Kondo de carga não inteira”. A temperatura Kondo pode ser determinada de maneira análoga ao caso do capítulo 2, considerando a largura do pico considerado e a distância deste em relação ao nível de Fermi. Ela é dada por $T_k^{(R)} = \sqrt{D\Gamma_\beta^-} e^{\pi(\epsilon_\beta^- - \epsilon_F)/2\Gamma_\beta^-}$, onde Γ_β^- é a largura do pico “ ϵ_β^- ”. O subnível ϵ_β^- resulta de um polo de ordem 2 da função de Green local. A determinação algébrica de sua largura, Γ_β^- é muito complicada, uma vez que depende dos parâmetros e do estado de carga do sistema. Portanto a temperatura $T_K^{(R)}$ será estimado pela análise do comportamento da densidade de estados com a temperatura. A figura 5.6 mostra o comportamento do pico Kondo neste regime. Note que este pico praticamente desaparece para $T = 0.01$, o que nos permite ter uma idéia da temperatura Kondo para os parâmetros do sistemas adotados.

A figura 5.7 mostra a densidade de estados do sistema para dois diferentes valores de V_g . A Fig. 5.7a ($V_g = 7.0$) mostra a situação onde ambos os picos secundários ϵ_β^- e ϵ_β^+ estão por cima do nível de Fermi. Note que não é desenvolvido nenhum pico no nível de Fermi. Analogamente, na Fig. 5.7b ($V_g = 2.0$), quando o pico ϵ_β^- está completamente por baixo de ϵ_F e ϵ_β^+ ainda um pouco por cima de ϵ_F . Também nesse caso não se desenvolve o pico no nível de Fermi. No caso de $V_g = 7.0$ o desaparecimento do pico se deve ao fato de que os dois desdobramentos do pico original ϵ_β estão por cima do nível de Fermi, fora do regime Kondo na região de transição de valência. Na situação

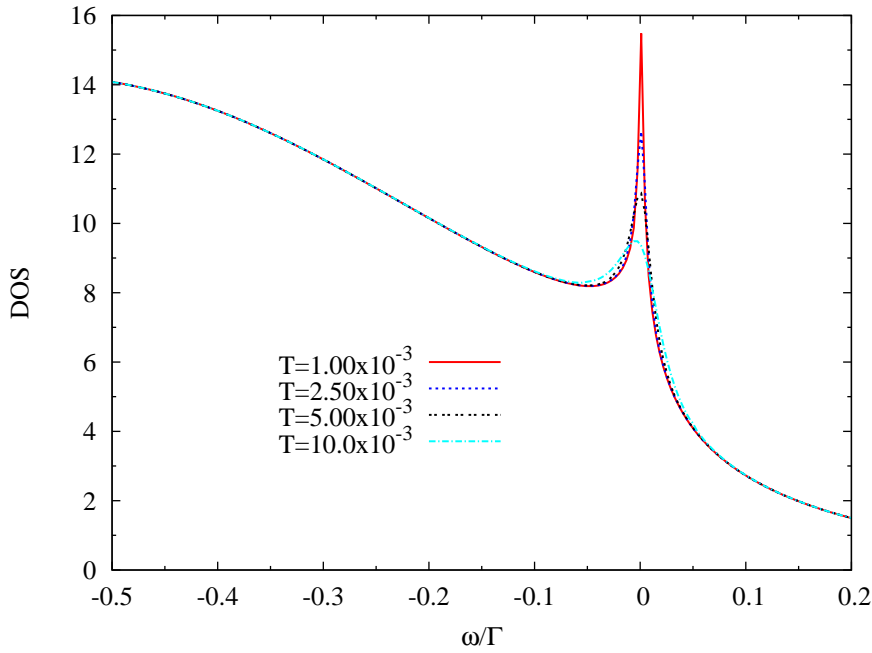


Figura 5.6: Pico Kondo no regime de Kondo de carga não inteira, para diversos valores da temperatura. Os parâmetros são os mesmos usados na Figura 5.5, Na legenda da figura, as temperaturas são dadas em unidade de Γ .

$V_g = 2.0$ o sub-pico superior se encontra no regime de transição de valência e o inferior com muito pouca carga e afastado do nível de Fermi como para constituir um estado fundamental de natureza Kondo.

Em resumo, nesse capítulo consideramos um PQ com dois níveis, na presença de interações no regime de Kondo e desdobramento de Rabi. Estudando a densidade de estados, observamos que o desdobramento de Rabi produz um efeito Kondo associado a uma carga não inteira, causado por uma ocupação parcial do estado desdobrado localizado próximo e por baixo do nível de Fermi. Ele é um regime Kondo peculiar caracterizado por duas temperaturas Kondo associadas a cada um dos dois subníveis produzidos por esse estado desdobrado.

A densidade de estados nos fornece uma pista do comportamento da condutância, quando o sistema é colocado entre dois reservatórios. Os picos Kondo na densidade de estados providencia um canal por onde elétrons podem atravessar o sistema. Nas condições de potencial de porta da figura 5.5 haveria por exemplo um platô na condutância em função do potencial de porta devido ao pico Kondo no nível de Fermi. Esses resultados fornecem um incentivo importante para estudar quais seriam as suas propriedades de transporte.

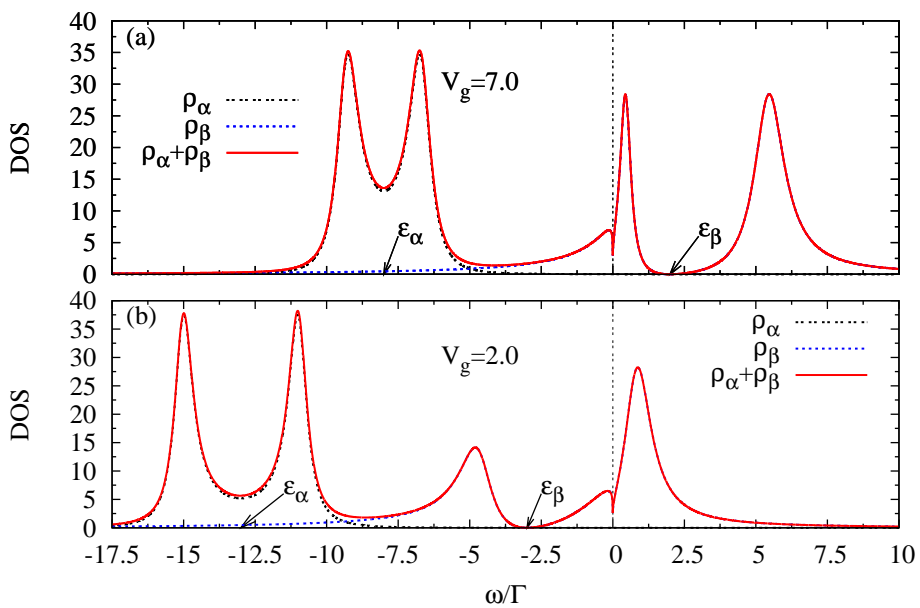


Figura 5.7: . Densidade de estados no regime de desdobramento de Rabi para diferentes potenciais de porta V_g . Para $V_g = 7.0$, painel (a), ambos os picos secundários estão por cima do nível de Fermi. Para $V_g = 2.0$, painel (b), apenas o nível secundário inferior está por baixo de ϵ_F . A linha vertical em $V_g = 0$ está sobre o nível de Fermi com um guia visual. Note que em ambos os casos não se desenvolve o pico no nível de Fermi. Os demais parâmetros são os mesmos usados na Figura 5.5, Na legenda da figura, as temperaturas são dadas em unidade de Γ .