

3 Nuvem Kondo em estruturas de PQ's.

3.1 Introdução

Neste capítulo o formalismo dos bósons escravos é aplicado no tratamento de um problema bastante discutido em física, que diz respeito a existência e a extensão espacial do que chamamos de "nuvem Kondo" (53, 54). O conceito de nuvem é utilizado para ilustrar uma estrutura de dimensões da ordem da extensão espacial da correlação entre o spin da impureza magnética e o spin dos elétrons da banda de condução criada pela interação Coulombiana na impureza localizada. Efeitos resultantes de dispersões angulares dificultam a observação dessa nuvem em sistemas de três ou até mesmo de duas dimensões, como no caso clássico de impurezas magnéticas depositadas sobre uma matriz metálica (64). A extensão não considerável da nuvem Kondo nessas dimensões explica, em parte, certos comportamentos, como a dependência linear das propriedades desses sistemas em relação ao número de impurezas, deixando evidente sua independência e o fato delas não se "enxergarem" magneticamente.

No tratamento do problema Kondo em uma dimensão, como no caso dos sistemas de PQ's que estudamos nesta tese, a nuvem Kondo pode se

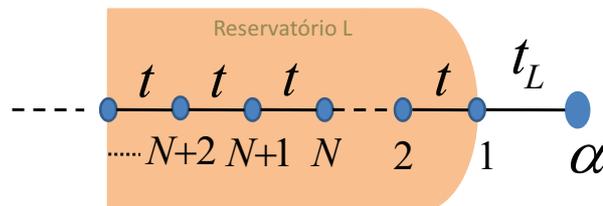


Figura 3.1: A figura mostra o sistema de um PQ com interação Coulombiana U conectado a um reservatório de elétrons. Na figura, evidenciamos a possibilidade de representarmos o reservatório como uma cadeia semi-infinita de PQ's não interagentes.

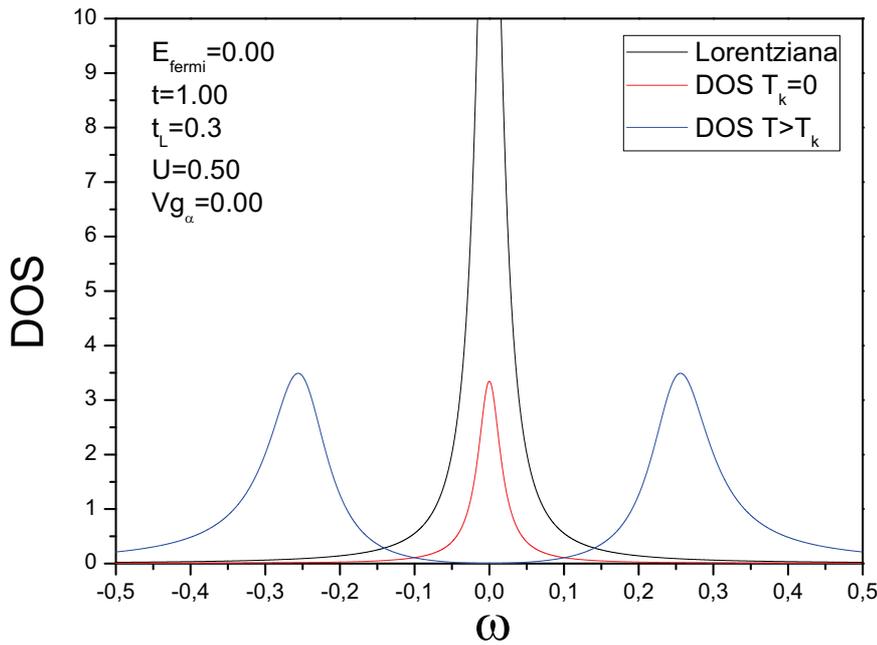


Figura 3.2: A figura mostra a DOS na impureza obtida para $T < T_k$ (linha vermelha) e $T > T_k$ (linha azul) da DOS em sítios no interior do reservatório. A curva em preto corresponde a uma gaussiana de mesma largura que o pico Kondo.

apresentar de forma bastante nítida, e com uma extensão que pode ser estimada de forma quantitativa através do método que estamos propondo, baseado no cálculo da densidade de estados local (DOS) em sítios localizados à diferentes distâncias da impureza. Para iniciar um estudo sobre as propriedades da nuvem Kondo consideramos neste capítulo o sistema simples apresentado no capítulo anterior, que consiste de um PQ interagente conectado a uma semi-cadeia infinita que, no caso, representa um reservatório de elétrons. Nesse sistema calculamos a DOS em diferentes sítios no interior do reservatório e analisamos a forma com que essas DOS são afetadas pela presença da impureza magnética, representada, neste caso, pelo PQ interagente α . Três métodos numéricos foram utilizados para o cálculo da DOS com o sistema no regime Kondo, o Método do aglomerado embebido (65), o método de renormalização numérica (66) e o método dos bósons escravos para U finito (34) apresentado no capítulo anterior. Comparando as DOS obtidas através destes métodos com as DOS obtida para o sistema fora de Kondo, que calculamos utilizando a aproximação Hubbard I (68), determinamos, entre outras coisas, a extensão da nuvem Kondo no interior do reservatório.

Nos capítulos seguintes estendemos o estudo da nuvem Kondo a sistemas mais sofisticados onde, além de determinar sua extensão, investigamos as consequências na estrutura da nuvem provocadas pela competição entre o

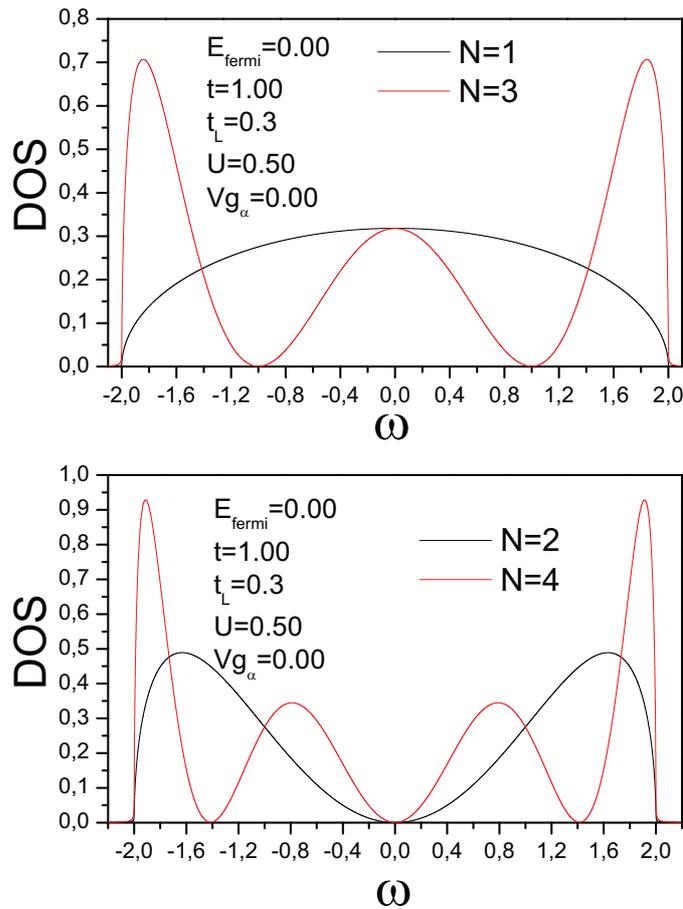


Figura 3.3: A figura mostra o comportamento para $T < T_k$ e $T > T_K$ da DOS nos quatro primeiros sítios de uma semi-cadeia desacoplada.

efeito Kondo e as correlações magnéticas no interior do sistema de PQ's. Mais especificamente, no capítulo quatro apresentamos um estudo no qual investigamos as propriedades referentes a estrutura da nuvem Kondo num processo de destruição gradativa do estado Kondo a medida que a interação antiferro entre os elétrons é aumentada num sistema de dois PQ's interagentes conectados diretamente entre si, como na figura 4.1. No capítulo cinco apresentamos um estudo semelhante, desta vez quando dois PQ's interagentes se enxergam a partir de um terceiro PQ não intergente. Este sistema serve como base para um estudo mais abrangente das propriedades da nuvem Kondo no processo de competição entre efeito Kondo e interação RKKY (79, 80, 81) numa estrutura em que dois PQ's interagentes que são separados por uma cadeia de N sítios. Neste caso a nuvem Kondo pode ser estudada na cadeia central e dentro dos contatos metálicos.

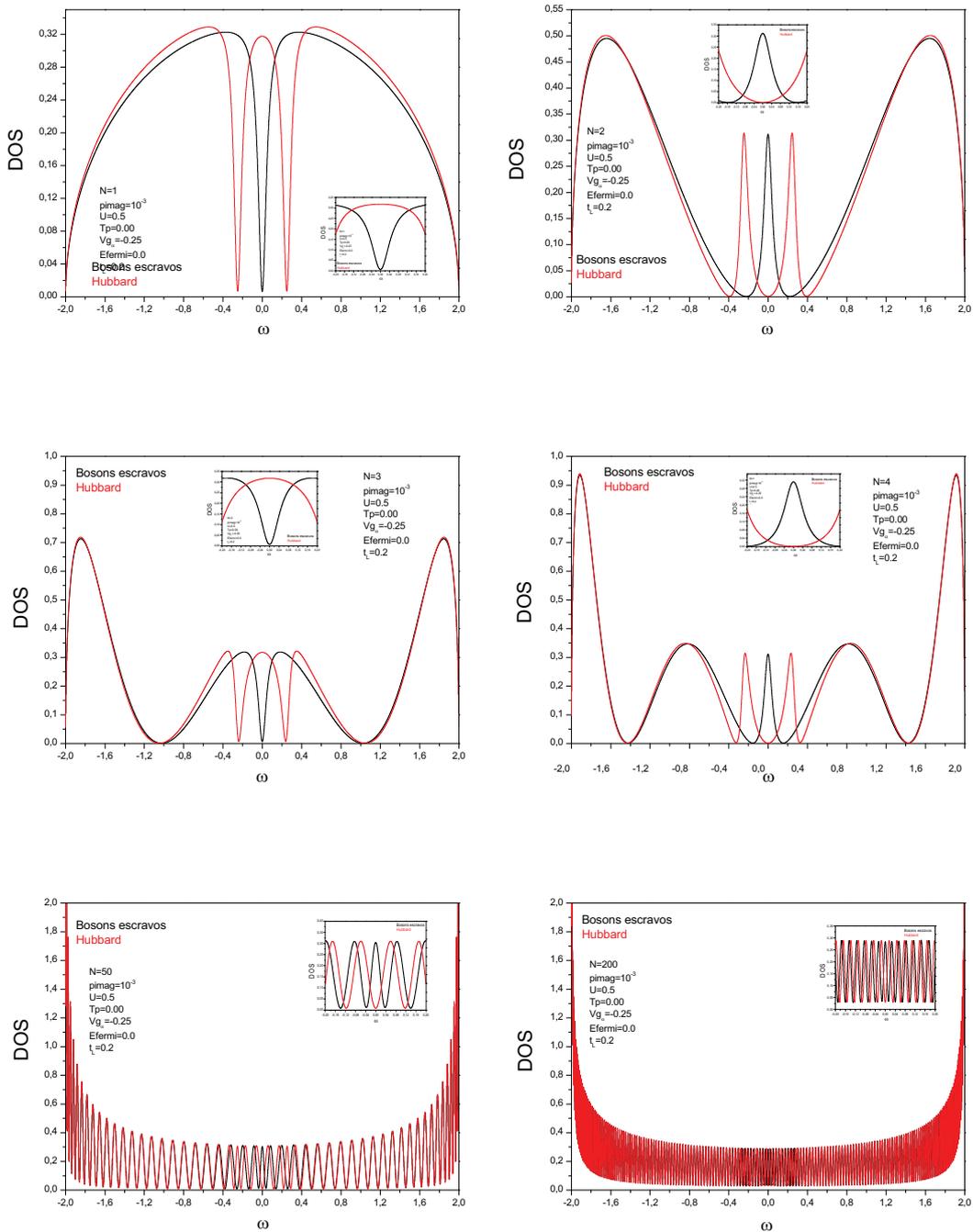


Figura 3.4: A figura mostra o comportamento para $T < T_k$ e $T > T_K$ da DOS em sítios no interior do reservatório L mostrado na figura 3.1.

3.2

Existência e extensão da nuvem Kondo

A extensão da nuvem Kondo pode ser estimada considerando que o tempo de vida das quase partículas Kondo estão relacionados com a escala de tempo $\tau_k \approx \frac{\hbar}{k_B T_k}$. Considerando que essas quase-partículas se propagam com a velocidade de Fermi v_F , podemos associar o comprimento da nuvem com a quantidade

$$R_k \approx \frac{\hbar v_F}{k_B T_k}. \quad (3-1)$$

É importante observar que a quantidade v_F que aparece nessa expressão não é bem definida, uma vez que todos os elétrons que compõem a estrutura da nuvem estão dentro da faixa de energia do pico Kondo. Além disso, espera-se que esses elétrons não se propagam em bloco com velocidade v_F , mas com uma velocidade renormalizada v^* que, pela teoria de férmions pesados, é obtida como sendo $v^* = \frac{k_F}{m^*}$, onde m^* é a massa efetiva da quase partícula. A não incorporação destas propriedades na expressão 3-1 pode gerar resultados inexatos no que se refere ao comprimento R_k da nuvem Kondo. Por outro lado, essa expressão poderia, em princípio, nos fornecer de forma correta a dependência de R_k com a temperatura Kondo T_k e, de certa forma, uma referência através da qual podemos estimar o comprimento da nuvem Kondo.

Do ponto de vista teórico o problema da nuvem Kondo têm sido analisado utilizando-se diferentes métodos (56, 57, 59, 61). O estudos das propriedades de spin, através da suscetibilidade local ou da função de correlação espacial entre spins, têm fornecido contribuições significantes no que se refere a compreensão desse fenômeno. (56, 57, 59, 61, 62) Mais próximo do trabalho que estamos propondo, a análise da condutância através de um ponto quântico inserido num fio quântico (53), ou correntes persistentes num anel finito, utilizando argumentos de renormalização ou cálculos feitos com DMRG, também foram propostos como alternativas para a determinação da nuvem Kondo.

Recentemente, um método variacional foi proposto para estudar a propagação, a partir da impureza, de um buraco na densidade de estados local (64). Neste trabalho, foi possível mostrar que, em duas e três dimensões, a extensão da nuvem Kondo é da ordem de poucos comprimentos de onda apenas, devido ao efeito provocado por dispersões angulares, de tal forma que R_K é praticamente zero nessas dimensões. Isso parece explicar a irrelevância da nuvem Kondo em alguns sistemas estudados experimentalmente. Por outro lado, em sistemas de uma dimensão, a interação impureza-impureza pode ser determinada pelo comprimento R_k da nuvem Kondo. Isso produz importantes

consequências para as propriedades de condução e, portanto, deve ser levado em consideração na constituição de sistemas de PQ's integrados.

Voltando à nossa proposta, a possibilidade de se utilizar a expressão 3-1 para estimar o comprimento da nuvem Kondo é reforçada pelo trabalho de A. Holzner e co-autores (67), que calcularam as correlações de spin envolvidas na formação da nuvem Kondo num sistema de uma dimensão e obtiveram que o alcance dessa nuvem cai com o inverso da temperatura Kondo, de acordo com nossa equação.

Motivados por estes resultados, utilizamos o método dos bósons escravos para estudar o comportamento da nuvem Kondo no sistema que descrevemos no capítulo anterior, composto por um PQ conectado a um reservatório de elétrons. Nesse estudo estimamos o comprimento da nuvem Kondo a partir das propriedades eletrônicas e não das magnéticas. Para isto investigamos a propagação do efeito do pico Kondo localizado na impureza ao resto de sua vizinhança. Os resultados que obtivemos com o método dos bósons escravos são comparados com resultados obtidos a partir do método do aglomerado embebido(ECA) e com o grupo de renormalização numérica(NRG).

3.3

Cálculo da densidade de estados local

Na figura 3.1 enfatizamos a possibilidade de representar o reservatório de elétrons como uma semi-cadeia infinita de PQ's ¹. A densidade de estados local no sítio N, no interior dessa semi-cadeia, é dada por

$$\rho_N(\omega) = \frac{-1}{\pi} \text{Im}(G_{N,N}), \quad (3-2)$$

onde $G_{N,N}$ é a função de Green diagonal calculada neste sítio. Essa função permite saber como as quase-partículas do efeito Kondo, na vizinhança do nível de Fermi, se manifestam a uma distância N do sítio da impureza e pode ser escrita como

$$G_{N,N}(\omega) = \frac{g_N}{1 - t^2 g_N g_{N+1} - t^2 g_N g_{N-1}}, \quad (3-3)$$

onde as funções \tilde{g}_{N+1} e \tilde{g}_{N-1} descrevem, respectivamente, as partes do sistema correspondentes aos sítios a esquerda e a direita de N. Na figura 3.5 destacamos o sítio N no interior do contato metálico. Nesta figura destacamos que a estrutura do sistema a esquerda do sítio N corresponde a uma semi-cadeia infinita, sendo representada pela função $\tilde{g}_{N+1} = \tilde{g}_L = \frac{\omega \pm \sqrt{\omega^2 - 4t^2}}{2t^2}$. Já para a

¹Ver apêndice C na referência (32).

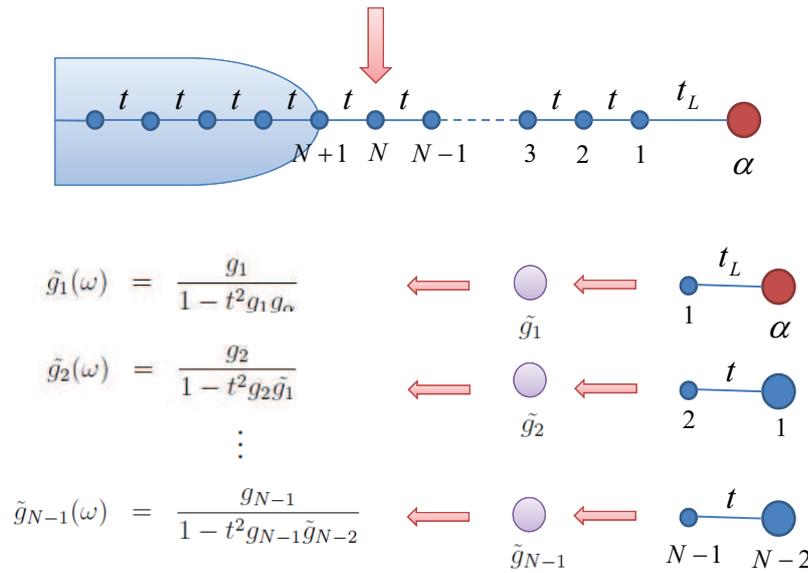


Figura 3.5: A figura mostra a disposição dos sítios no interior da semi-cadeia que representa o contato metálico. Esta figura é construída de forma tal a localizar um determinado sítio N no interior desta semi-cadeia e tornar evidente que a função de Green que descreve os sítios a esquerda de N , \tilde{g}_{N+1} , é uma função de Green de uma semi-cadeia infinita, sendo igual a \tilde{g}_1 . Já para os sítios a direita de N é apresentado nesta figura um processo de renormalização a partir do qual a função de Green \tilde{g}_{N-1} , que descreve esta parte do sistema.

estrutura a direita de N , apresentamos nessa figura um processo de renormalização através do qual esta parte do sistema é construída sítio a sítio, sendo descrita pela função g_{N-1} . Após N iterações obtemos para esta função

$$\tilde{g}_{N-1} = \frac{g_{N-1}}{1 - t^2 g_{N-1} \tilde{g}_{N-2}}, \quad (3-4)$$

onde $g_i = 1/(\omega - \epsilon_i - i\eta)$ é a função de Green de um corpo associada ao i -ésimo sítio da semi-cadeia.

Na figura 3.4 mostramos a DOS calculada em alguns sítios no interior da semi-cadeia com o método dos bósons escravos. Esse resultado é obtido com $U = 0.5t$, $t_L = 0.3t$ e com potencial de porta ajustado na posição de simetria partícula-buraco, $Vg_\alpha = -\frac{U}{2}$. A DOS a temperatura zero é representada pelas linhas pretas. Nas linhas vermelhas, por comparação, mostramos a DOS quando $T > T_k$ e o sistema está fora do regime Kondo. Para obter essa solução utilizamos a aproximação Hubbard I (68), que elimina as correlações de spin entre a impureza e o reservatório. Para entender os resultados apresentados é interessante analisar as figuras 3.2 e 3.3. Na figura 3.2 a curva vermelha e azul descrevem a DOS calculada na impureza para $(T = 0)$ e $(T > T_k)$, respectivamente. Nessa figura a curva preta representa uma Lorentziana que,

como discutido nas próximas seções, tem como intuito envolver o pico Kondo e eliminar oscilações irrelevantes para o cálculo da extensão do pico Kondo (Oscilações de Friedel (58) ²). Na figura 3.3 mostramos a DOS calculada para os primeiros quatro sítios da semi-cadeia isolada e observamos que, no nível de Fermi, essa grandeza assume ordenadamente um valor finito para N ímpar e é zero para N par.

Os resultados mostrados na figura 3.4 descrevem essencialmente a hibridização entre a DOS da impureza (curva vermelha na figura 3.2) e da semi-cadeia isolada 3.3, uma vez que a impureza é acoplada a semi-cadeia. Essa hibridização se manifesta através de uma ressonância ou uma anti-ressonância observada na DOS calculada no interior da semi-cadeia como resultado da presença de um pico na DOS da impureza centrado no nível de Fermi (pico Kondo). Se nos concentrarmos nessa faixa de energia observamos que aparece ressonância num determinado sítio N se a DOS calculada no sítio correspondente da semi-cadeia desacoplada for zero no nível de Fermi. Por outro lado, se a DOS num determinado sítio apresentar uma anti-ressonância no nível de Fermi, a DOS correspondente para a semi-cadeia desconectada é diferente de zero. Essa mudança ressonância/anti-ressonância sítio a sítio na DOS é de fundamental importância para o que iremos discutir no resto do capítulo. Nosso interesse é distinguir os efeitos provocados na DOS calculada num determinado sítio no interior do reservatório pela presença ($T < T_k$) ou ausência ($T > T_k$) de uma ressonância no nível de Fermi da DOS calculada para a impureza. O alcance do efeito produzido pela hibridização da semi-cadeia com a impureza em sítios localizados cada vez mais no interior do reservatório é utilizado como uma medida da extensão da nuvem Kondo.

A figura 3.4 mostra o efeito provocado na DOS pela hibridização da semi-cadeia desacoplada com a impureza magnética, representada pelo PQ α . Se observarmos a região de energia próxima ao nível de Fermi ($\omega \simeq 0$) notamos uma diferença acentuada entre as DOS calculadas para $T = 0$ e $T > T_k$, com uma ressonância ou uma anti-ressonância que, como mencionado anteriormente, vão se intercalando sítio a sítio. Essa diferença resulta da presença de um pico na DOS da impureza para $T = 0$ (pico Kondo) e se torna menor, no sentido de abranger uma região mais fina do espectro de energia, a medida que entramos no reservatório. Utilizando uma Lorentziana, como a apresentada na figura 3.2 (curva preta), concentraremos nossa atenção na região próxima ao nível de Fermi, e extrairemos a essência da perturbação no mar de Fermi provocada pela presença da impureza no regime Kondo. Os dois últimos quadros da figura 3.4

²Em nosso trabalho as oscilações de Friedel resultam da integral $\int_{-\infty}^{\infty} f(\omega, T) \text{Im}G_{NN}(\omega) d\omega$ sobre a distribuição de Fermi $f(\omega, T)$ à temperatura $T = 0$.

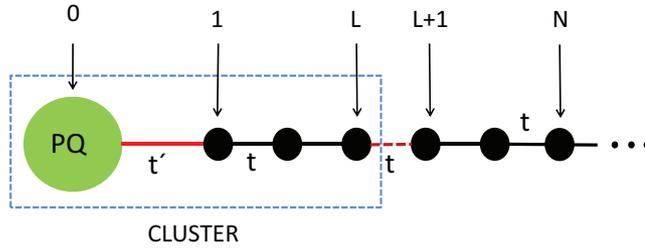


Figura 3.6: A figura destaca, através da linha pontilhada, o aglomerado de PQ's que é considerado no método do aglomerado embebido(ECA).

mostram que essa perturbação se estende por uma região limitada no interior do reservatório aparecendo fracamente no sítio $N = 50$ e muito menos ainda no sítio $N = 200$, relativamente afastado da impureza. Nosso objetivo nesse capítulo é investigar como a influência do estado Kondo no mar de Fermi se estende espacialmente dependendo da única escala de energia associada ao regime Kondo, a temperatura Kondo T_k .

3.4 Outros métodos numéricos

Nesta seção apresentamos o resumo de dois outros métodos numéricos que são utilizados no tratamento do problema Kondo em estruturas nanoscópicas. No caso, o método do aglomerado embebido(ECA) e o método do grupo de renormalização numérica(NRG). Na próxima seção, os resultados que se referem as propriedades da nuvem Kondo, e que são obtidos com esses métodos, são comparados com os resultados que obtivemos com o método dos bósons escravos para U finito que apresentamos no capítulo anterior. A discussão das propriedades da nuvem Kondo envolvendo esses três métodos se faz importante no sentido de dar confiabilidade ao estudo desenvolvido nesta tese, no que diz respeito a extensão espacial da nuvem Kondo.

3.4.1 Método do aglomerado embebido

O método do aglomerado embebido é utilizado no estudo de sistemas de PQ's que consistem de uma região interagente fracamente acoplada a bandas de condução não interagentes que consideramos unidimensionais. O método é baseado na ideia de que os efeitos de muitos corpos provocados pela impureza tem um caráter local, e consiste de três etapas que iremos descrever através da aplicação ao sistema de uma impureza que estamos tratando. A primeira etapa

consiste em isolar um aglomerado composto pela impureza conectada com os L primeiros sítios mais próximos do contato que é descrito por uma semi-cadeia. Esse aglomerado é mostrado na figura 3.6 por uma linha tracejada, sendo o primeiro sítio fora do cluster corresponde ao índice $i = L+1$, e engloba a maior parte dos efeitos de muitos corpos presentes no sistema. A segunda etapa do método consiste em diagonalizar exatamente o Hamiltoniano que corresponde ao cluster, utilizando, por exemplo, o método de Lanczos (69), e calcular todas as funções de Green. A terceira etapa é vestir estas funções de Green utilizando uma equação de Dyson (65) e incorporar nessas funções a física que corresponde ao resto sistema.

Sendo $g_{i,j}$ a função de Green que propaga um elétron entre os sítios i e j dentro do aglomerado e g_{L+1} a função de Green do primeiro sítio fora do aglomerado, a função de Green vestida no sítio i dentro do aglomerado é obtida a partir da equação de Dyson

$$G_{ii} = g_{ii} + g_{iL}tG_{L+1,i}, \quad (3-5)$$

onde, por sua vez,

$$G_{L+1,i} = g_{L+1}tG_{Li}. \quad (3-6)$$

Observamos que o parâmetro t na equação 3-5 corresponde a união entre o aglomerado, onde estão englobados os efeitos provenientes das interações de muitos corpos, e o resto dos sítios pertencentes a semi-cadeia. Esse elemento de matriz possui os mesmos valores que todos os outros termos de hopping dentro da semi-cadeia. Resolvendo esse sistema de equações podemos obter as funções de Green do sistema completo de onde é possível obter uma série de propriedades físicas como a condutância através da impureza e a DOS nos sítios do sistema. Para o estudo da nuvem Kondo os resultados usando o método do ECA foram desenvolvidos pelos professores Carlos Büsser e George Martins da Okland University, USA.

3.4.2

Grupo de renormalização numérica

O método do grupo de renormalização numérica foi originalmente proposto por K. G. Wilson para estudar problemas associados a impurezas magnéticas. Inicialmente, esse método foi aplicado ao Hamiltoniano Kondo (39), e depois estendido ao modelo de Anderson (38). Este método numérico permite estudar, em princípio exatamente, as propriedades dos es-

tados eletrônicos muito perto do nível de Fermi de qualquer um desses dois modelos. Numa descrição breve do método apresentamos as duas principais etapas para a sua implementação. A primeira consiste em dividir a banda de condução em um conjunto de intervalos de energia discretizados logaritmicamente $[x_n, x_{N-1}]$, definido por $x_N = D\Lambda^{-N}$, onde Λ é o parâmetro de discretização e D é a metade da largura da banda de condução. Então, para cada intervalo, apenas um valor representativo de energia é considerado³. O número total de energias representativas, uma para cada valor, resulta num conjunto de energias discretizadas que se acoplam a impureza. Depois desses dois passos, o Hamiltoniano total é mapeado numa semi-cadeia infinita, conhecida como cadeia de Wilson, onde cada sítio da cadeia corresponde a uma escala de energia na banda de condução discretizada logaritmicamente, com a impureza localizada no seu primeiro sítio. É importante notar que as conexões t_n entre os sítios adjacentes n e $n+1$, decrescem com a distância⁴ até a impureza, como $\Lambda^{-N/2}$. A forma final do Hamiltoniano no formalismo do grupo de renormalização fica

$$H = \lim_{N \rightarrow \infty} \Lambda^{-(N-1)/2} H_N, \quad (3-7)$$

com

$$\begin{aligned} H_N = & \Lambda^{(N-1)/2} [H_{imp} + t' \sum_{\sigma} (d_{\sigma}^{\dagger} c_{0\sigma} + c_{0\sigma}^{\dagger} d_{\sigma}) + \sum_{n=0, \sigma}^N \epsilon_n c_{n\sigma}^{\dagger} c_{n, \sigma} + \\ & + \sum_{n=0, \sigma}^{N-1} t_n (c_{n\sigma}^{\dagger} c_{n+1, \sigma} + c_{n+1\sigma}^{\dagger} c_{n, \sigma})], \end{aligned} \quad (3-8)$$

onde os operadores $d_{\sigma}^{\dagger} (d_{\sigma})$ e $c_{n\sigma}^{\dagger} (c_{n\sigma})$ criam(aniquilam) um elétron de spin σ na impureza e na cadeia semi-infinita, respectivamente.

Observamos que uma expressão analítica explícita para t_n na equação 3-8 não pode ser obtida para uma banda de formato arbitrário. No caso em questão, em que uma banda semi-elíptica é usada, somos forçados a calcular t_n numericamente. Destacamos a importância de não confundir o termo de hopping t_n que define a cadeia de Wilson com o elemento de matriz t da semi-cadeia mostrada na figura 3.1. O elemento t_n corresponde a banda obtida depois da discretização logarítmica de uma semi-cadeia que não está definida num espaço real. Pode ser mostrado que $t_n \rightarrow t$ quando $\Lambda \rightarrow 1$ (70).

O segundo passo importante consiste em resolver numericamente o Ha-

³ Esse valor é escolhido de acordo com um critério bem definido (71).

⁴ Nesse caso N não é um sítio do espaço real, portanto o termo utilizado não corresponde a uma distância propriamente dita.

miltoniano 3-7. Para isso, começamos com um sistema composto apenas pela impureza isolada, descrita pelo Hamiltoniano H_{imp} . Os sítios subsequentes são adicionados um a um. Esse processo produz uma sequência de Hamiltonianos H_N , que são resolvidos da seguinte maneira: numa dada iteração N o Hamiltoniano H_N é diagonalizado numericamente. Os autovetores e os autovalores correspondentes são obtidos. Depois, um novo sítio $N+1$ é adicionado. Isso é feito aumentando-se o espaço de Hilbert (associado a iteração N) através do produto tensorial de seus elementos com os estados do sítio adicionado na próxima iteração. Esse processo resulta num crescimento exponencial da dimensão do espaço de Hilbert após sucessivas iterações. Devido a limitações computacionais, é necessário truncar o espaço de Hilbert em cada iteração, depois que ele atinge um determinado tamanho. O critério de truncamento do NRG é pegar apenas os M estados de mais baixa energia de H_N (tipicamente, $M=1000$), e negligenciar os valores mais altos do espectro de energia.

O processo de adicionar um único sítio a H_N é repetido até o sistema atingir o ponto fixo de acoplamento mais forte. Quando esse ponto é atingido, H_N e H_{N+2} possuem os mesmos autovalores.

A sequência de iterações descritas acima pode ser pensada como um processo associado a um grupo de renormalização. Adicionar um sítio a cadeia, e obter um novo espectro de energia, pode ser entendida como uma transformação de um grupo de renormalização R que mapeia o Hamiltoniano H_N num novo Hamiltoniano $H_{N+1} = R(H_N)$, que têm a mesma forma que H_N . Uma vez que os pontos fixos são obtidos, as propriedades estáticas e dinâmicas do sistema, assim como os efeitos relacionados a temperatura, são calculados. O número de iterações na obtenção dos pontos fixos depende do parâmetro de discretização Λ . Quanto maior o valor deste parâmetro mais rápido é o processo de convergência, mas pior é a descrição dos estados longe do nível de Fermi. Em geral, $2 < \Lambda < 4$ é o intervalo de valores de Λ que permite conciliar os dois efeitos opostos. Em particular, estamos interessados na função de Green local da impureza.

Na parte final do capítulo apresentamos alguns resultados obtidos com o grupo de renormalização numérica para o problema da nuvem Kondo que estamos tratando. Esses resultados são comparados com os do método dos bósons escravos e foram obtidos pelo professor Edson Vernek da Universidade de Uberlândia com $\Lambda = 2.5$, pegando os $M=1000$ estados de mais baixa energia em cada interação. Para calcular a DOS na impureza, a função delta foi alargada utilizando-se Gaussianas Logarítmicas com um fator $b = 0.6$.

3.5

Resultados numéricos

Nesta seção apresentamos os resultados que obtivemos com o método dos bósons escravos para o problema da extensão espacial da nuvem Kondo dentro do contacto metálico L mostrado na figura 3.1. No sentido de enfatizar a validade dos resultados obtidos para a extensão da nuvem Kondo comparamos nossos resultados com os obtidos através do Método do Aglomerado Embebido (ECA) e do Grupo de Renormalização Numérica (NRG) que foram discutidos no capítulo anterior.

Se considerarmos a largura Δ do pico Kondo proporcional a T_k , como mencionamos na parte introdutória deste capítulo, temos que o valor estimado para comprimento R_k da nuvem Kondo é dado por

$$R_k \approx \frac{1}{\Delta}. \quad (3-9)$$

Em nossa proposta vamos estimar esse comprimento através da perturbação na DOS local nos sítios dentro da semi-cadeia provocada pela presença do pico Kondo na impureza quando o sistema está em $T = 0$ relativo a situação quando ele está a $T > T_k$. Essa perturbação, num determinado sítio N no interior da semi-cadeia, é quantificada pelo valor absoluto da função $F(N)$, que definimos por

$$F(N) = \int_{-\infty}^{+\infty} [\rho_N^k(\omega) - \rho_N^{nk}(\omega)] L_\Delta(\omega) d\omega, \quad (3-10)$$

onde ρ_N^k e ρ_N^{nk} são as DOS locais no sítio N no interior da semi-cadeia, calculadas para $T = 0$ e $T > T_k$, respectivamente. $L_\Delta(\omega)$ é uma Lorentziana de largura Δ , que utilizamos com o objetivo de eliminar as oscilações de Friedel e concentrar nossa investigação aos efeitos produzidos na faixa de energia próxima ao nível de Fermi. De fato, os resultados que apresentamos na figura 3.4 para ρ_N^k e ρ_N^{nk} no interior dos reservatórios mostram que a diferença entre essas DOS só é considerável na região em torno desse nível de energia.

Os resultados dessa figura também mostram que, a medida que entramos no reservatório, os efeitos em torno do nível de Fermi provocados pela presença do pico Kondo na impureza vão diminuindo, como podemos observar nos dois últimos quadros da figura, para $N = 50$ e $N = 200$. Nesses sítios $\rho_N^k = \rho_N^{nk}$ e $F(N) \approx 0$. A função $F(N)$ pode, então, ser utilizada para obter a escala de comprimento a partir da qual a presença da impureza se torna irrelevante e da mesma maneira a nuvem Kondo.

Na figura 3.7 é mostrado em escala logarítmica o valor absoluto de $F(N)$

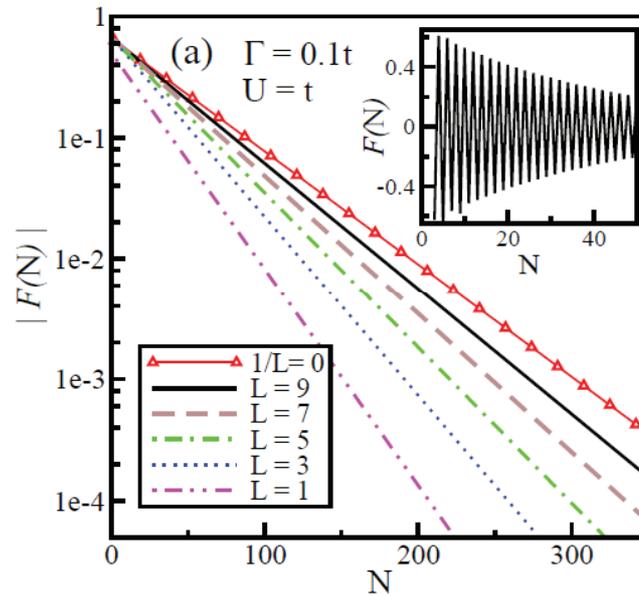


Figura 3.7: A figura mostra a função $F(N)$, calculada utilizando ECA para diferentes tamanhos L do aglomerado. Os parâmetros utilizados são $U = t$ e $\Gamma = 0.1t$. Nesta figura a curva vermelha apresenta uma extrapolação de $F(N)$ para o limite termodinâmico.

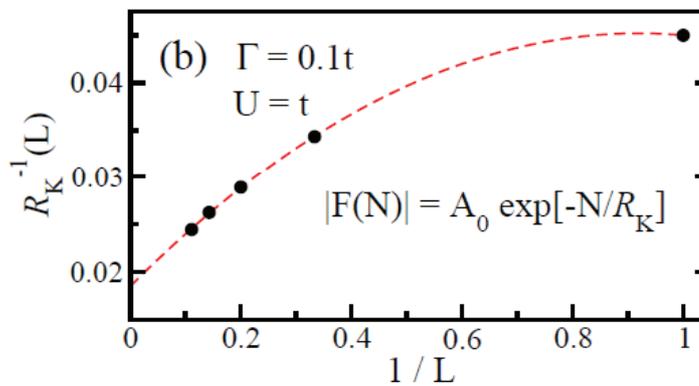


Figura 3.8: A figura mostra a uma extrapolação de R_k ao regime termodinâmico quando o comprimento L do aglomerado tende a infinito.

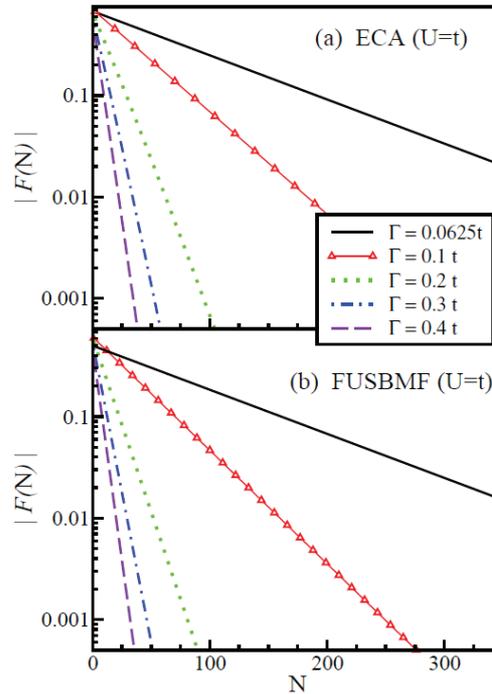


Figura 3.9: A figura mostra a função $F(N)$ para diferentes valores da constante de acoplamento Γ . Em (a) temos a extrapolação de $F(N)$ ao limite termodinâmico para cada valor de Γ e em (b) temos os resultados obtidos com o método dos bósons escravos.

em função de N , calculado pelo método do aglomerado embebido (ECA). Para esse resultado adotaram-se os parâmetros $U = t$, $\Gamma = 0.1t$ e diferentes valores para o comprimento L do cluster. As curvas pontilhadas descrevem a função $F(N)$ para alguns valores de N , para diferentes comprimentos L do aglomerado. Observamos neste gráfico que, para todos os valores de L considerados, a função $F(N)$ se comporta como uma exponencial do tipo

$$|F(N)| = A_0 e^{-N/R_k}. \quad (3-11)$$

As linhas sólidas na parte (A) da figura 3.11 mostram que a equação 3-11 fita perfeitamente os resultados obtidos. As partes (b) e (c) da figura mostram que os resultados obtidos com o método dos bósons escravos para U finito e com o grupo de renormalização, respectivamente, também estão de acordo com a equação 3-11. Voltando a figura 3.7 notamos no quadro menor que $F(N)$ oscila entre valores positivos e negativos para sucessivos N . Isso é consequência direta da oscilação ressonância/anti-ressonância discutida na seção 1.2.

A figura 3.8 mostra, num gráfico de R_k em função de $1/L$, a extensão

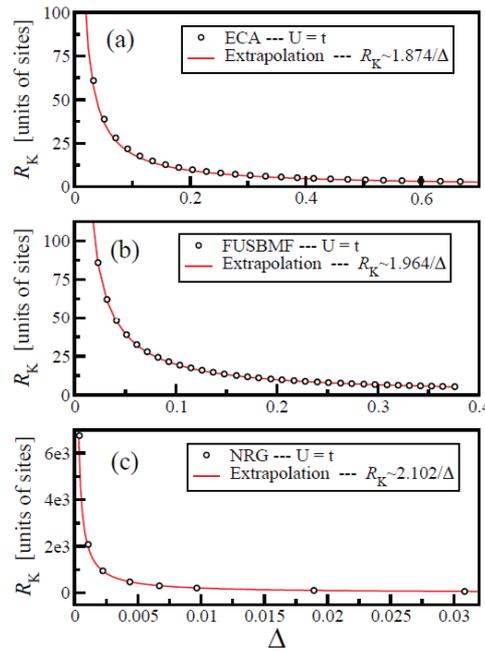


Figura 3.10: A figura mostra, para os três métodos discutidos, o comprimento R_k da nuvem Kondo em função da largura Δ do pico Kondo no nível de Fermi.

da nuvem Kondo para os diferentes tamanhos de aglomerado considerados no cálculo com ECA. Esses resultados são fitados por uma função polinomial (linha pontilhada) a partir da qual podemos obter uma extrapolação para o valor de R_k quando o comprimento do cluster é infinito ($L \rightarrow \infty$). O valor de R_k resultante dessa extrapolação pode ser substituído na função 3-11 para obter o limite termodinâmico da curva $F(N)$, que, para $\Gamma = 0.1t$, corresponde aos triângulos abertos mostrado na figura 3.7.

Observamos que com o Grupo de Renormalização e com o método dos bósons escravos o comprimento do aglomerado é $L = 0$ e não existe extrapolação para a função $F(N)$. Nesse caso os A_0 e R_k são obtidos diretamente do gráfico obtido para $F(N)$. No caso, as curvas cortam o eixo das ordenadas em $\ln A_0$ e seus coeficientes angulares são dados por $-1/R_k$.

Depois que mostramos como o limite termodinâmico de R_k é obtido para os três métodos utilizados, queremos analisar a dependência desses valores com os parâmetros do sistema. Na parte (a) da figura 3.9 apresentamos as curvas $F(N)$ obtidas com os valores extrapolados de R_k usando o método do aglomerado embebido para $U = 1.0$ e diferentes valores da constante de acoplamento Γ (de 0.0625 à 0.4). Esse resultado mostra que R_k decresce com o aumento gradativo de Γ . Este resultado se mostrou consistente com o que obtivemos, na parte (b) da figura, com o método dos bósons escravos. Como esperado, observamos que o comprimento da nuvem Kondo (calculado a partir da função $F(N)$) aumenta com U/Γ . Podemos entender esse comportamento

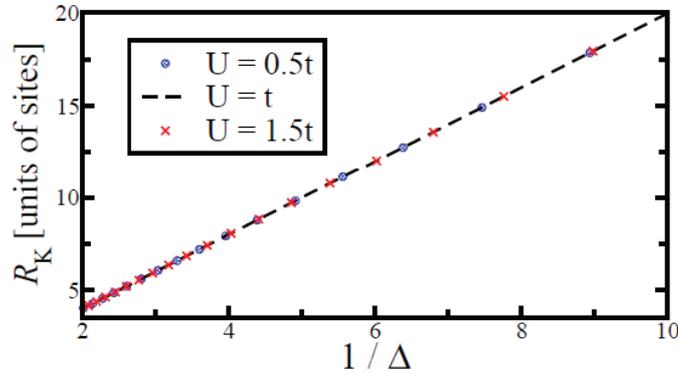


Figura 3.11: A figura mostra o comprimento da nuvem Kondo em função de $1/\Delta(T_k)$ para três diferentes valores U da interação Coulombiana na impureza.

notando que, com o aumento de Γ (para um valor fixo de U), a temperatura Kondo T_k também aumenta e R_k , conforme obtemos, decai.

Na figura 3.11 mostramos o decaimento de R_k para diferentes valores de Γ obtidos em (a) utilizando ECA, em (b) bósons escravos e em (c) utilizado NRG. Esses resultados são graficados em função da semi-largura Δ do pico Kondo. Observamos que a dependência de R_k com Δ satisfaz a relação dada pela equação 3-9. Para enfatizar isso cada conjunto de dados, obtidos com cada um dos métodos, é fitado com uma função proporcional a $1/\Delta$. O resultado é apresentado na figura 3.11 e mostra que o coeficiente de proporcionalidade entre R_k e $1/\Delta$ são bem similares nos três métodos empregados. No caso, $R_k \approx 2.0/\Gamma$. O fator de proporcionalidade na equação 3-9 é de 1.847 para ECA, 1.964 para os bósons escravos e 2.102 para o NRG. Enquanto que esses fatores são semelhantes entre ECA e bósons escravos, existe uma discrepância de aproximadamente 10% com o NRG. Acredita-se que essa diferença é proveniente do parâmetro b utilizado nesse método para alargar na DOS através de uma gaussiana logarítmica, uma vez que o valor Δ obtido pelo NRG é muito sensível a escolha desse parâmetro arbitrário.

A figura 3.11 mostra os resultados de R_k em função de $1/\Delta$ obtidos com ECA para diferente valores de U (0.5, 1.0 e 1.5). Esses resultados mostram que as curvas colapsam para a mesma reta. Isso indica que a propagação do efeito Kondo dentro do reservatório depende apenas do parâmetro relevante do fenômeno Kondo, que é a temperatura T_k independentemente de parâmetros como a interação Coulombiana U .

A figura 3.12 mostra o comportamento do parâmetro A_0 em função de

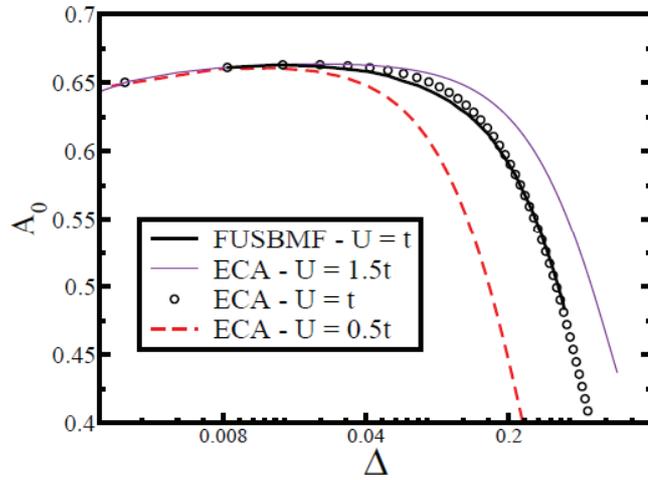


Figura 3.12: A figura mostra o parâmetro A_0 em função de Δ calculado com os bósons escravos e com ECA. Diferentes valores de U foram utilizados com ECA. Observamos que, quando Δ é pequeno, todas as curvas coincidem, como esperado, se pensarmos em termos do caráter universal que caracteriza o efeito Kondo. Aumentando Δ entramos num regime de flutuação de valência e as curvas para diferentes valores de U começam a divergir.

Δ , obtido com ECA e com bósons escravos. Observamos uma concordância entre as curvas obtidas com esses dois métodos para $U = 1.0$. Cálculos com $U = 0.5$ e $U = 1.5$ foram realizados apenas com ECA. Para esses resultados adicionais é observado que as curvas são diferentes para valores grandes de Δ mas se tornam iguais para pequenos valores desse parâmetro $\Delta < 0.04$ e praticamente independentes de Δ . Isto implicaria que a função $|F(N)|$ tem um comportamento universal trivial em função de N/R_k nesta região de Δ . Esse comportamento é entendido perfeitamente se levarmos em conta o comportamento universal do efeito Kondo, no sentido que ele é determinado por uma única escala de energia, a temperatura Kondo T_k . A forte dependência de A_0 em função de Δ , ou seja T_k para valores de $\Delta > 0.04$ é de ser esperado já que nessa região o sistema entra na região de flutuação de valência, em forma mais acentuada para os valores menores de U , já que os cálculos foram obtidos na situação de simetria elétron-buraco.

3.6

Conclusões

Sintetizando os aspectos globais que foram abordados em relação as propriedades da nuvem Kondo observamos que é a primeira vez que a DOS

local é utilizada para se estimar a extensão espacial R_k da nuvem Kondo dentro do reservatório de elétrons, que aparece como consequência dos efeitos de muitos corpos produzidos pela impureza magnética.

O comprimento da nuvem Kondo, R_k , tem sido definido na literatura como a extensão da nuvem de spins eletrônicos formada na vizinhança da impureza. Deste ponto de vista, esse comprimento corresponde essencialmente ao tamanho espacial da correlação spin-spin entre a impureza local e elétrons da banda de condução. No entanto, deixamos claro em nosso trabalho que a contrapartida espectral da carga eletrônica desse fenômeno, associada ao pico Kondo na impureza e seus efeitos na DOS local dos sítios no interior dos reservatórios, é também uma medida da nuvem Kondo. Embora esta idéia não seja explorada nesta tese, consideramos que a medição da extensão da nuvem Kondo possa ser melhor determinada experimentalmente a partir de uma medição de transporte utilizando um dispositivo STM, com a ponta podendo ser deslocada ao longo do sistema, que uma medição da correlação de spin de maior dificuldade de realização. De todas as formas até o momento a extensão da nuvem Kondo não foi possível de ser determinada experimentalmente. Apesar de representarem, essencialmente, manifestações espectrais e de spin para os mesmos fenômenos físicos, observamos que é mais fácil calcular a função $F(N)$ do que obter funções baseadas em correlação de spin.