

## 6

### Efeito Kondo e correlação eletrônica num sistema de três PQ's interagentes

#### 6.1

##### Introdução

Este capítulo é dedicado ao estudo das propriedades físicas e de transporte numa estrutura de três PQ's com um PQ central conectado a dois contatos metálicos. Como materialização para esse sistema encontramos na natureza a molécula de Polyoxometalate (27), proposta como um dispositivo capaz de operar como uma porta lógica quântica baseada num arranjo experimental envolvendo uma ponta de STM conectada na região central da molécula que funciona no regime de valência mista como um reservatório eletrônico. A função de onda dos elétrons não localizados podem se superpor a dos elétrons

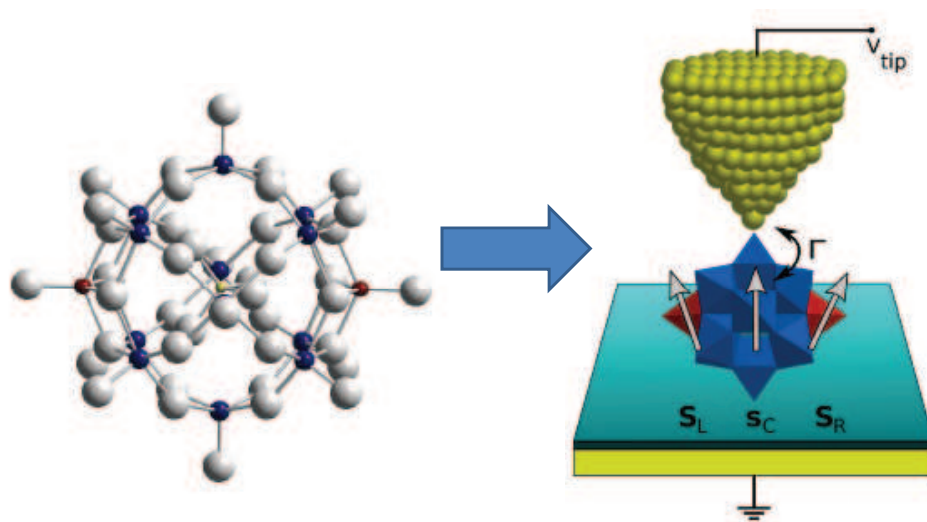


Figura 6.1: A figura mostra em (A) a molécula real polyoxometalate proposta por D.Loss e em (B) uma representação dessa molécula conectada a dois reservatórios de elétrons através do PQ central. Nessa estrutura estudamos a correlação entre os spins  $S_L$  e  $S_R$  em função da ocupação do PQ central, cujo spin total é representamos por  $S_C$ .

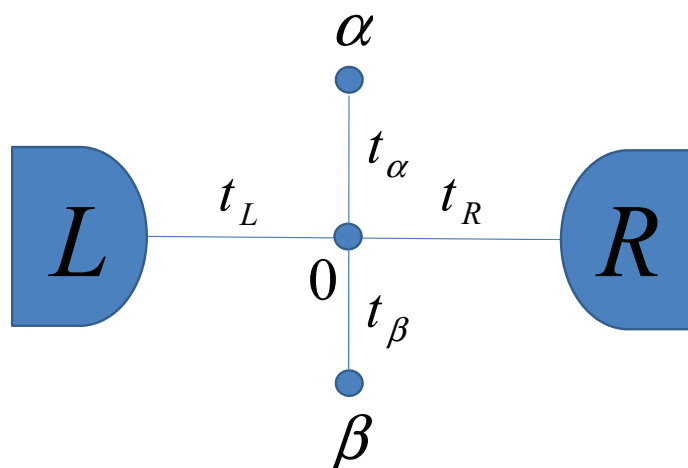


Figura 6.2: A figura mostra uma molécula artificial composta por três PQ's interagentes. O PQ 0 se conecta aos eletrodos L e R, bem como aos demais PQ's,  $\alpha$  e  $\beta$ , formando a estrutura de PQ's apresentada.

que existem nas regiões laterais da molécula e dos elétrons ligados a sua parte central. Os spins eletrônicos nessas regiões se enxergam magneticamente de forma indireta por intermédio dos elétrons da parte central, sendo o sinal dessa correlação dependente do estado de carga nessa parte da molécula. Que este sistema possa funcionar como uma porta quântica (24, 25) está baseado na possibilidade de se controlar o estado de carga na parte central da molécula pela aplicação de um potencial externo através de um eletrodo metálico, e com isso manipular o sinal da correlação entre os spins dos elétrons situados nos átomos que compõem a parte externa da molécula (29). A possibilidade de se controlar a correlação magnética e, em consequência, a orientação relativa entre os spins faz dessa molécula ou, em geral, de uma estrutura de três PQ's (23), uma potencial candidata a funcionar como uma porta quântica, dispositivo capaz de armazenar e processar a informação quântica contida nos spins externos e que interagem ferro ou antiferromagneticamente entre eles.

A vantagem em se utilizar um sistema de PQ's assim como apresentamos na figura 6.2 está na versatilidade desse tipo de estrutura no que diz respeito a possibilidade de controle das propriedades dos PQ's a partir de eletrodos metálicos. De fato, através destes contatos podemos aplicar potenciais de porta  $V_i$  (com  $i = \alpha, 0, \beta$ ) e com isso regular o estado de carga nos PQ's e a magnitude de suas conexões com o resto do sistema. Em nossa proposta o potencial de porta é ajustado de forma a deixar os PQ's laterais ocupados com apenas um elétron. Dependendo da magnitude das conexões do PQ central com os reservatórios  $t_{L(R)}$  e com os PQ's laterais  $t_{\alpha(\beta)}$ , bem como do estado de ocupação deste PQ, podemos encontrar o sistema em diferentes regimes. No

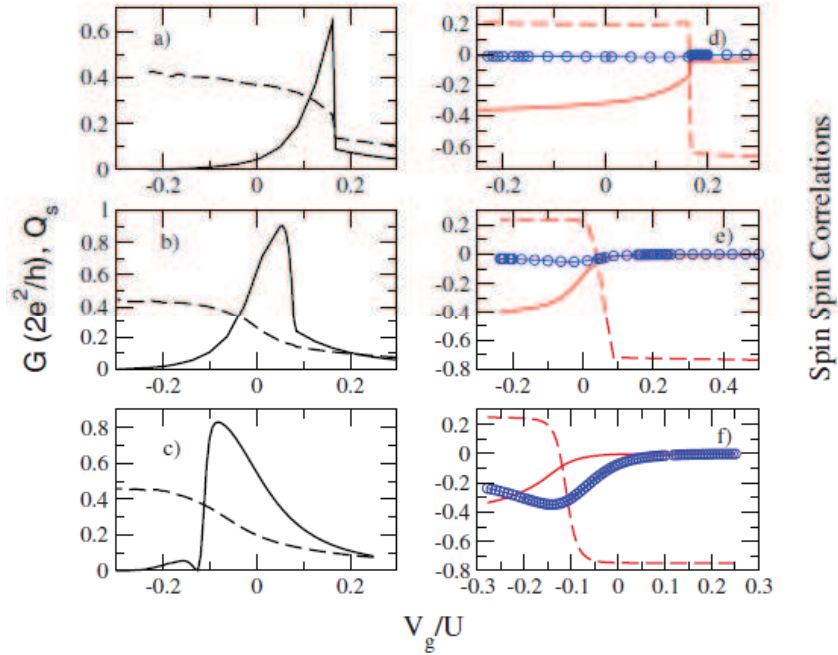


Figura 6.3: Os resultados apresentados a esquerda da figura mostram a condutância (linha contínua) e a carga no PQ central (linha tracejada). No lado direito os gráficos mostram as correlações de spin entre as diferentes partes do sistema, sendo  $S_\alpha S_\beta$  representado pela linha tracejada,  $S_L S_0$  pelas linhas circulares e  $S_{\alpha(\beta)} S_0$  pela linha contínua. Os resultados (a) e (b) correspondem a  $t_{\alpha(\beta)} = 0.4$ , (b) e (e) a  $t_{\alpha(\beta)} = 0.2$  e (c) e (f) a  $t_{\alpha(\beta)} = 0.05$ .  $J = 0$ ,  $U = 2$  e  $t_{L(R)} = 0.3$ .

caso, observamos a coexistência de um regime Kondo de dois estágios (17, 18) e uma correlação ferro entre os spins dos PQ's externos para pequenos valores de  $t_{\alpha(\beta)}$ . De acordo com o que vimos no primeiro capítulo o regime Kondo de dois estágios resulta do acoplamento dos spins laterais com o spin do PQ central que a sua vez se acopla Kondo com os spins dos reservatórios de elétrons. Este regime está caracterizado por duas temperaturas,  $T_{K1}$  e  $T_{K2}$ , com  $T_{K2} < T_{K1}$ . Os resultados mostram que aumentando o valor das conexões com os PQ's laterais, esse efeito é destruído e o sistema passa a um estado molecular com correlação ferro entre os elétrons dos PQ's externos.

No que diz respeito a temperatura  $T$  estudamos sua influência sobre as propriedades de transporte para diferentes valores dos parâmetros que definem a estrutura. Os resultados mostram que o aumento de  $T > T_{K2}$  resulta na destruição do efeito Kondo de dois estágios, com recomposição do pico Kondo no PQ central na região próxima ao nível de Fermi já que para  $T < T_{K2}$  o pico

Kondo apresenta uma anti-ressonância no nível de Fermi (17). A recomposição da DOS nessa região abre um canal de condução que se reflete no aumento da condutância entre os reservatórios. Quanto aos bósons escravos, analisamos o comportamento com a temperatura dos parâmetros  $Z_0$  e  $ZZ_0$  introduzidos pelo método e que renormalizam as conexões do PQ central com os reservatórios e com os PQ's laterais, respectivamente. Os resultados mostram que, do ponto de vista do formalismo, e para pequenos valores das conexões laterais  $t_{\alpha(\beta)}$ , o efeito provocado pelo aumento da temperatura consiste basicamente no estreitamento do pico Kondo e no eventual desacoplamento dos PQ's  $\alpha$  e  $\beta$ . Vimos também que as propriedades do sistema são insensíveis com a temperatura quando as conexões  $t_{\alpha(\beta)}$  são relativamente grandes e o sistema se encontra no regime molecular.

## 6.2

### Efeito Kondo e o conceito de porta lógica

Esta seção é dedicada a compreensão dos detalhes referentes ao transporte de elétrons através do sistema de PQ's que estamos propondo e, principalmente, de que forma essa estrutura pode ser utilizada como uma porta lógica quântica (24), dispositivo que serve como uma das motivações para este trabalho. Na computação em geral, uma porta lógica, como o próprio nome indica, funciona como um dispositivo onde são realizadas operações lógicas sobre o que chamamos bits de entrada. No caso, esses bits de entrada correspondem aos valores 0 e 1 associados a passagem ou não de corrente elétrica através de um transistor e correspondem a menor unidade de informação que pode ser armazenada. Uma das propostas da computação quântica consiste em utilizar como bits de entrada os estados  $|0\rangle$  e  $|1\rangle$  correspondentes as projeções de spin "up" e "down" em estruturas de PQ's e realizar operações sobre esses "bits quânticos" (qbits) através de um dispositivo que acopla no tempo, ferro ou antiferromagneticamente, de forma controlada, os spins. Isto cria a possibilidade de se operar sobre estados quânticos emaranhados  $|e\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$  mudando o seu grau de emaranhamento de acordo com um algoritmo que estabelece determinadas operações lógicas fixadas pelo objetivo numérico proposto. Este processo permite um enorme ganho no que se refere a velocidade de processamento de um computador quântico quando comparado com seu equivalente clássico.

No trabalho que estamos desenvolvendo levantamos a possibilidade de se utilizar a estrutura de PQ's mostrada na figura 6.2 como um dispositivo

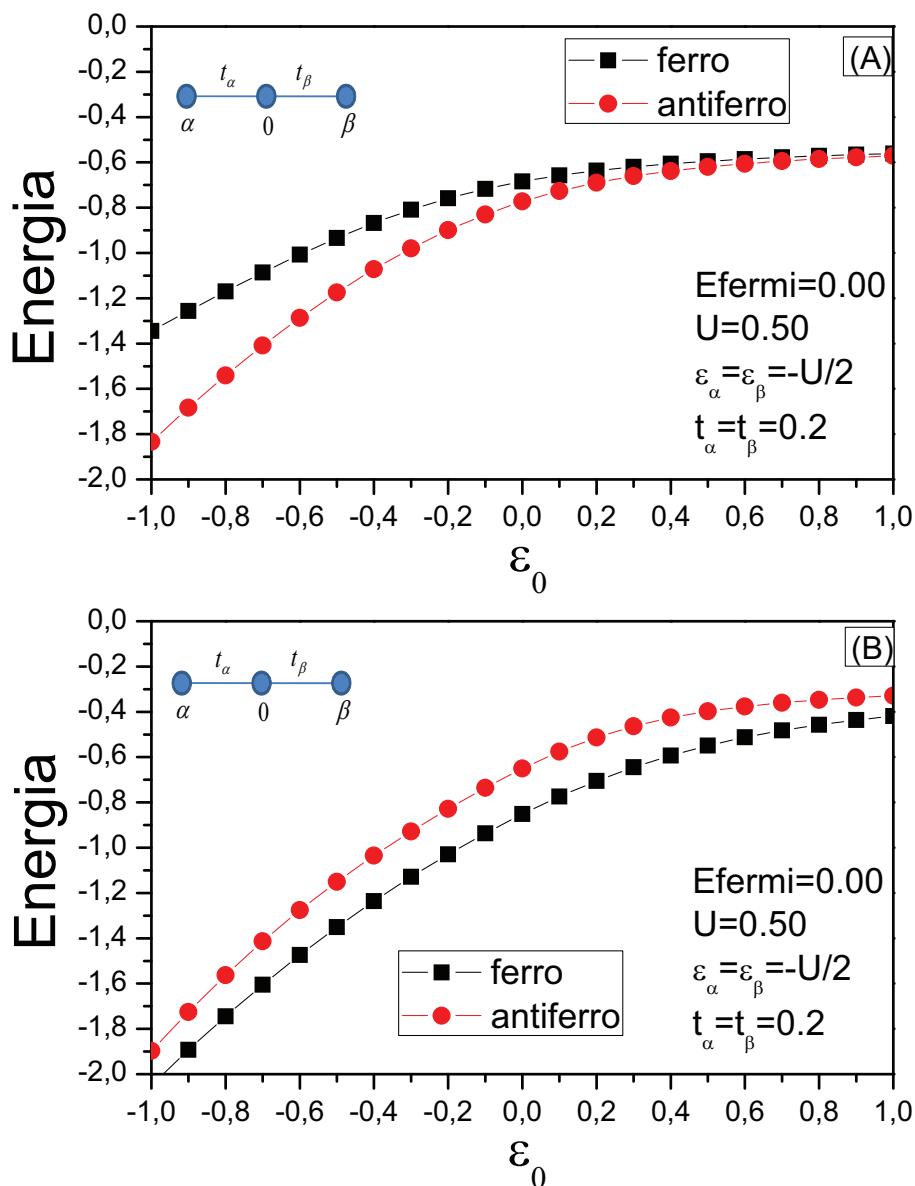


Figura 6.4: A figura mostra as soluções ferro e antiferro para o sistema de três PQ's isolados. Em (A) o sistema é ocupado com dois elétrons e em (B) com três. Observamos que no primeiro caso a solução dominante é antiferro enquanto que no segundo a solução é ferro. De acordo com o resultado da figura 3 essa propriedade é mantida quando o sistema é conectado aos reservatórios.

que pode funcionar como uma porta quântica de duas entradas. Em nosso modelo os qbits de entrada correspondem as projeções "up" e "down" dos spins dos PQ's  $\alpha$  e  $\beta$ . Estes spins podem se acoplar magneticamente formando um estado emaranhado ferro ou anti-ferro, sendo  $S_L \cong 1$  e  $S_L \cong 0$ , respectivamente operando com o potencial de porta que atua sobre ele. Este acoplamento pode ser manipulado mudando o estado de carga do PQ central. No caso, com o PQ central ocupado, a correlação entre os spins laterais é ferro favorecendo energeticamente o estado com  $S_L \cong 1$ . Caso contrário, com o PQ central sem carga, a correlação entre estes é anti-ferro e o estado fundamental possui  $S_L \cong 0$ . De fato, considerando os três PQ's isolados, o Hamiltoniano que descreve o sistema pode ser representado numa base de número de elétrons  $N = 2$  de  $m$  estados e de  $N = 3$  de  $m'$  estados. Os conjuntos de  $m$  e  $m'$  estados constituem uma base para um espaço de funções de dois e três elétrons, respectivamente.

Escolhendo uma base de funções adequadas é possível definir subespaços invariantes que conservam a projeção de spin repartindo as matrizes que representam o Hamiltoniano de dois e três elétrons em blocos de  $S_T = 1$  e  $S_T = 0$ , onde  $S_T$  é um bom número quântico e representa o spin total do sistema de três PQ's. Assim, para o sistema com dois elétrons escrevemos uma base

$$\varphi_1^F = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow, 0, \downarrow\rangle + |\downarrow, 0, \uparrow\rangle) \quad (6-1)$$

$$\varphi_2^F = \frac{1}{2}(|0, \uparrow, \downarrow\rangle + |\uparrow, \downarrow, 0\rangle + |0, \downarrow, \uparrow\rangle + |\downarrow, \uparrow, 0\rangle), \quad (6-2)$$

que define um subespaço de spin total  $S_T = 1$ . O estado de mais baixa energia desse subespaço corresponde a uma interação ferro entre os spins dos PQ's laterais uma vez que o estado  $\varphi_1^F$ , que descreve uma correlação desse tipo, é bastante favorecido do ponto de vista estatístico quando comparado aos outros estados da base. No caso, o índice  $F$  que aparece nas funções se referem ao tipo de correlação representada pelo estado de mais baixa energia do subespaço, e não ao tipo de correlação representada por cada uma das funções que constituem a base. A energia desse estado pode ser obtida numericamente a partir do Hamiltoniano,

$$H_{(2e)}^F = \begin{pmatrix} \epsilon_\alpha + \epsilon_\beta & \sqrt{2}t_\alpha \\ \sqrt{2}t_\alpha & \epsilon_0 + \epsilon_\alpha/2 + \epsilon_\beta/2 \end{pmatrix},$$

representado na base que acabamos de definir. Ainda para o sistema com dois

elétrons podemos escrever uma outra base

$$\varphi_1^{AF} = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow, 0, \downarrow\rangle - |\downarrow, 0, \uparrow\rangle) \quad (6-3)$$

$$\varphi_2^{AF} = \frac{1}{2}[|0, \uparrow, \downarrow\rangle + |\uparrow, \downarrow, 0\rangle - |0, \downarrow, \uparrow\rangle - |\downarrow, \uparrow, 0\rangle] \quad (6-4)$$

$$\varphi_3^{AF} = \frac{1}{2}|0, \uparrow\downarrow, 0\rangle \quad (6-5)$$

$$\varphi_4^{AF} = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0, 0, \uparrow\downarrow\rangle - |\uparrow\downarrow, 0, 0\rangle), \quad (6-6)$$

que define um subespaço de spin total  $S_T = 0$ . A exemplo do que acontece no subespaço de  $S_T = 1$ , o estado  $\varphi_1^{AF}$ , que descreve uma correlação anti-ferro entre os spins laterais, é bastante favorecido quando comparado aos outros estados que constituem a base. Isso contribui para que o estado de mais baixa energia contido nesse subespaço descreva uma interação anti-ferro entre os spins dos PQ's externos. A energia desse estado é obtida a partir do Hamiltoniano

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

escrito na base que define o subespaço de  $S_T = 0$ . Na parte (A) da figura 6.4 apresentamos as curvas dos estados de menor energia que correspondem aos subespaços  $S_T = 0$  e  $S_T = 1$  de dois elétrons em função do potencial de porta aplicado na base do PQ central. Esse resultado mostra que, para o sistema com dois elétrons, o estado fundamental do sistema corresponde a uma configuração de  $S_L \cong 0$ , sendo  $S_L$  o spin total entre os dois PQ's laterais (que não é um bom número quântico). Como consequência, os spin externos possuem correlação anti-ferro entre eles.

Passando a considerar o sistema com três elétrons, escrevemos uma base

$$\varphi_1^F = \frac{1}{\sqrt{6}}(2|\uparrow, \downarrow, \uparrow\rangle - |\uparrow, \uparrow, \downarrow\rangle - |\downarrow, \uparrow, \uparrow\rangle) \quad (6-7)$$

$$\varphi_2^F = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0, \uparrow\downarrow, \uparrow\rangle - |\uparrow, \uparrow\downarrow, 0\rangle) \quad (6-8)$$

$$\varphi_3^F = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow, 0, \uparrow\downarrow\rangle - |\uparrow\downarrow, 0, \uparrow\rangle) \quad (6-9)$$

$$\varphi_4^F = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0, \uparrow, \uparrow\downarrow\rangle - |\uparrow\downarrow, \uparrow, 0\rangle), \quad (6-10)$$

que define um subespaço invariante de spin total  $S_T = 1/2$ . O estado de menor

energia pertencente a este subespaço corresponde a uma interação ferro entre os spins laterais e pode ser obtido a partir do Hamiltoniano

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

representado nessa base. Consideramos ainda outra base invariante de H,

$$\varphi_1^{AF} = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow, \uparrow, \downarrow\rangle - |\downarrow, \uparrow, \uparrow\rangle) \quad (6-11)$$

$$\varphi_2^{AF} = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow, 0, \uparrow\downarrow\rangle + |\uparrow\downarrow, 0, \uparrow\rangle) \quad (6-12)$$

$$\varphi_3^{AF} = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow, \uparrow\downarrow, 0\rangle + |0, \uparrow\downarrow, \uparrow\rangle) \quad (6-13)$$

$$\varphi_4^{AF} = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0, \uparrow, \uparrow\downarrow\rangle + |\uparrow\downarrow, \uparrow, 0\rangle), \quad (6-14)$$

também de spin total  $S_T = 1/2$  para o sistema de três elétrons. Como resultado do peso atribuído a  $\varphi_1^{AF}$ , o estado de menor energia pertencente a esse subespaço corresponde a uma correlação anti-ferro entre os PQ's laterais. Nessa base de estados, o Hamiltoniano de três elétrons fica escrito como

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

Diagonalizando os Hamiltonianos  $H_{(3e)}^F$  e  $H_{(3e)}^{AF}$  obtemos as energias dos estados de natureza ferro e anti-ferro associadas aos estados de mais baixa energia dos dois subespaços de  $S_T = 1/2$ . Na parte (B) da figura 6.4 apresentamos esse resultado em função do potencial de porta aplicado ao PQ central e concluímos que a configuração de mais baixa energia e que corresponde ao estado fundamental do sistema é ferro. Assim, de acordo com o que havíamos dito, concluímos que os spins dos PQ's laterais possuem correlação tipo ferro quando um elétron ocupar o PQ central e tipo anti-ferro quando este PQ se encontrar num estado de ocupação zero. O resultado apresentado na figura 6.3 (23), obtido usando uma diagonalização exata de um aglomerado, mostra que essa propriedade é preservada quando os três PQ's são conectados aos reservatórios de elétrons através do PQ central. Nesta figura as curvas tracejadas de cor preta nos quadros a esquerda e de cor vermelha



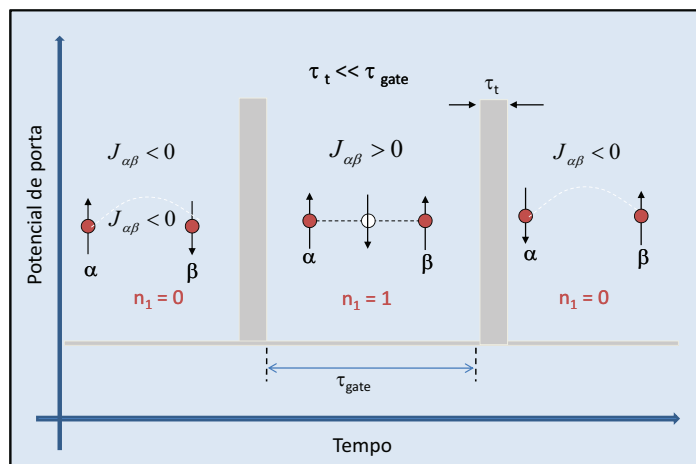


Figura 6.5: A figura apresenta um esquema mostrando as escalas de tempo envolvidas no processo de operação no modelo de porta quântica que estamos propondo.

nos quadros a direita representam, respectivamente, a carga que entra no PQ central em função do potencial de porta  $Vg_0$  aplicado na base deste PQ e a correlação  $S_\alpha S_\beta$  entre os spins dos PQ's laterais em função desse mesmo potencial. De fato, observamos nestes resultados que a transição do sistema de um estado anti-ferro a outro ferro acompanha a entrada de um terceiro elétron no sistema através do PQ central.

### 6.2.1

#### Funcionamento da porta lógica

Para ter um entendimento completo de como o sistema de três PQ's que estamos apresentando pode funcionar como uma porta quântica seria necessário um estudo dependente do tempo, uma vez que essa porta opera através da manipulação no tempo do estado de carga do PQ central e das consequentes permutações entre os estados ferro e antiferro formados pelos spins dos PQ's externos. No entanto, um estudo das propriedades estacionárias desse sistema já se apresenta bastante esclarecedor se pensarmos que os processos físicos que ocorrem no dispositivo são controlados por diferentes escalas de tempo, como ilustrado na figura 6.5. Nessa figura apresentamos um esquema onde são mostrados os processos físicos que ocorrem durante a operação desta porta lógica quântica e, também, os tempos associados a cada um desses processos. Mais especificamente, a figura mostra uma escala

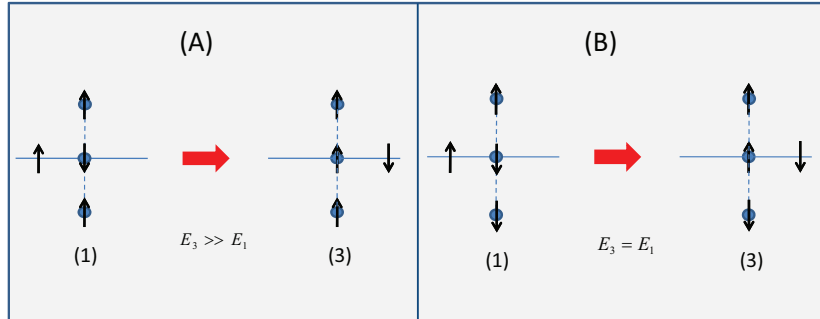


Figura 6.6: A figura mostra em (a) a incompatibilidade do efeito Kondo com a interação ferro e em (b) a compatibilidade desse efeito com a interação anti-ferro.

de tempo associada a transição do estado de carga do PQ central de 0 para 1 elétron, ou vice versa, e outra correspondente ao tempo de evolução dos spins nos PQ's laterais, como consequência do acoplamento com o spin do PQ central quando este está carregado. A primeira escala, que chamamos de tempo de tunelamento, depende da posição do potencial de porta aplicado ao PQ central  $Vg_0$ , e da conexão  $t_{L(R)}$  desse PQ com o reservatório  $R(L)$ , sendo dada por  $\tau_t \sim \frac{\hbar|Vg_0|}{t_{L(R)}^2}$ . Já a segunda escala de tempo envolvida é conhecida como tempo da porta e depende da magnitude da interação Coulombiana  $U$  no PQ central e das conexões laterais  $t_{\alpha(\beta)}$ , podendo ser escrita como  $\tau_g \sim \frac{\hbar U}{t_{\alpha(\beta)}^2}$ , que corresponde ao tempo do processo durante o qual os spins externos interagem no interior da estrutura para que o sistema funcione como uma porta lógica (23, 24). Lembremos que a interação magnética entre os spins é da ordem de  $t_{\alpha}^2/U$ .

No que se refere as escalas de tempo envolvidas na operação da porta quântica, para que esta funcione de forma adequada, é necessário que  $\tau_g \gg \tau_t$ , sendo quase que instantânea a transição entre os estados de carga do PQ central em comparação com o tempo de evolução dos spins laterais resultante de seu acoplamento com esse PQ. Por outro lado, o processo de leitura da informação quântica, baseada numa medida de transporte fora do regime Kondo deveria poder diferenciar uma configuração ferro de outra anti-ferro para o qual seria necessário pequenos valores de  $t_{L(R)}$  e, como consequência, valores de  $\tau_t$  bem maiores que os exigidos para a operação adequada da porta quântica. De fato, na proposta de porta quântica apresentada na referência (27) a leitura do spin total referente aos PQ's externos é realizada a partir da condutância

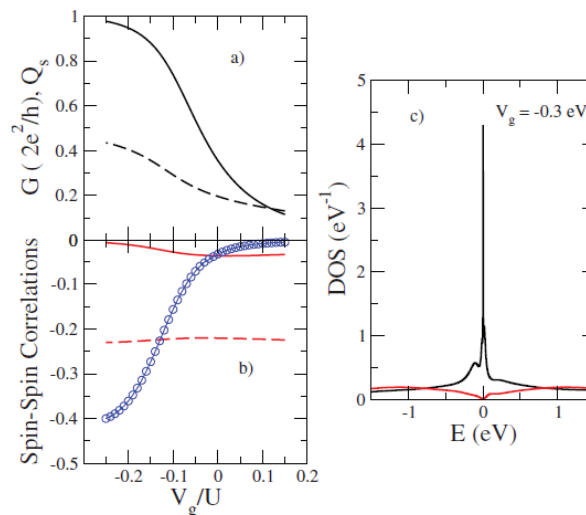


Figura 6.7: A figura mostra em (a) a condutância (linha contínua) e a carga no PQ central (linha tracejada), em (b) a correlações de spin  $S_\alpha S_0$  (linha contínua),  $S_L S_0$  (linha com círculos) e  $S_u^z S_L^z$  (linha tracejadas), e em (c) a DOS local no PQ central (linha de cor preta) e nos PQ's laterais (linha de cor vermelha). Estes resultados correspondem a  $t_{\alpha(\beta)} = 0.4$ ,  $J = 0.4$ ,  $U = 2$  e  $t_{L(R)} = 0.3$ .

medida através do PQ central com o sistema num regime de acoplamento fraco (cotunneling regime). Como uma alternativa a esse problema é proposto a mudança no tempo das conexões  $t_{L(R)}$  variando-se a distância entre a ponta de STM e a molécula de forma controlada, o que é bastante desafiador do ponto de vista experimental. Segundo essa proposta o valor da conexão com os reservatórios seria aumentado durante as transições do estado de carga do PQ central, que passa de zero para um e de um para zero elétron, e é drasticamente diminuída no momento de fazer a leitura da informação, para que esta se torne possível. No entanto é conhecido que os tempos envolvidos na mudança de posição da ponta é da ordem de milissegundos, muito maior que os tempos envolvidos na dinâmica de funcionamento da porta quântica, o que faz de fato o funcionamento da porta quântica inviável.

Para evitar estas dificuldades estamos propondo que a condutância seja medida estando o sistema num regime molecular, com  $t_{L(R)} \sim t_{\alpha(\beta)}$  e para valores de  $Vg_{\alpha(\beta)}$  entre 0 e  $U$ , com  $Vg_{\alpha(\beta)}$  negativo. Esses parâmetros asseguram o bom funcionamento da porta, como já havíamos dito, pois sendo  $t_{L(R)}$  grande os tempos de tunelamento são pequenos. Por outro lado, estando  $T < T_K$ , a diferença entre as condutâncias obtidas para as configurações ferro e anti-ferro

devido ao efeito Kondo permitiria distinguir entre essas duas configurações sem mudar o valor de  $t_{L(R)}$ . O processo de leitura seria possível precisamente porque sendo  $t_{L(R)}$  grande, o efeito Kondo desempenha um papel fundamental. Pode ser mostrado que esse efeito está diretamente associado a um resultado para a condutância que depende da configuração entre os spins dos PQ's laterais. Mais especificamente a informação referente ao alinhamento ferro ou anti-ferro dos PQ's externos se reflete no estabelecimento ou não do efeito Kondo no sistema(23). No caso de um alinhamento ferro entre os spins laterais, com o sistema no regime molecular, o efeito Kondo não aparece e a condutância medida é praticamente zero. Por outro lado o efeito Kondo é compatível com um alinhamento anti-ferro entre spins laterais e a condutância do sistema seria alta permitindo assim através de um estudo do transporte eletrônico fazer uma distinção clara entre uma configuração ferro e outra anti-ferro. No caso da configuração anti-ferro a presença de um elétron no PQ central durante o processo de medida da corrente tende a modificar a orientação anti-ferro existente quando o PQ se encontrava vazio. O regime Kondo, entretanto, vai demorar um tempo  $\tau_K$  para ser destruído, sendo este tempo da ordem de um décimo da inversa da temperatura Kondo  $T_K$  (30). Para que o dispositivo possa funcionar este tempo deve ser maior que o processo de medida da condutância como para permitir que o regime Kondo tenha uma influência clara sobre ela. Isto pode ser conseguido manipulando os parâmetros do sistema. Este é um fenômeno fora do equilíbrio. Para entender qual é o efeito da correlação anti-ferro sobre a condutância pode ser feito um cálculo dessa grandeza em equilíbrio acrescentando uma interação de troca  $J$  muito pequena entre os spins de  $\alpha$  e  $\beta$ , que atua no sentido de estabilizar a configuração anti-ferro entre esses spins. Este cálculo não será feito aqui, mas os resultados obtidos com o método LDECA(23) e mostrados nas figuras 6.3 e 6.7 comprovam nosso raciocínio. De fato analisando as curvas contínua de cor preta e tracejada de cor vermelha obtidas, respectivamente, para a condutância e para a correlação de spin  $S_\alpha S_\beta$  nos quadrantes (a) e (d) da figura 6.3 observamos que o estado ferro presente na região  $-U < Vg_0 < 0$  impede o estabelecimento do regime Kondo no sistema e, como consequência, a condutância  $G \approx 0.0$ . Já na figura 6.7 observamos através das curvas contínua de cor preta em (a) e tracejada de cor vermelha em (b) que a condutância do sistema tende a seu valor máximo em  $G \approx 1.0$  quando a correlação entre os spins dos PQ's laterais é anti-ferro.

Com o objetivo de melhor entender o papel desempenhado pelo efeito Kondo no processo de leitura da informação quântica, apresentamos na figura 6.6 um esquema onde é mostrado o mecanismo através do qual um elétron pode tunelar de um reservatório a outro nas duas possíveis configurações entre

os spins dos PQ's laterais. Em (A) a correlação entre esses spins é ferro e em (B) anti-ferro. No primeiro caso observamos que a troca na orientação do spin do PQ central, estado através do qual se realiza o transporte eletrônico e também estado intermediário de uma teoria perturbativa (quarta ordem) para o efeito Kondo que corresponde a uma energia maior que a do estado inicial. Esta energia maior  $E_3 > E_1$ , resultado da impossibilidade do elétron do PQ central de saltar aos PQ's vizinhos, já que a configuração em que os três elétrons estão com o mesmo spin concorre com a constituição do estado Kondo. Com essa configuração a condutância através do sistema vai praticamente a zero já que na ausência do efeito Kondo o sistema sai de ressonância. Já na configuração anti-ferro mostrada em (B) observamos que o transporte de elétrons entre os reservatórios, com troca na orientação de spin do elétron no PQ central, conserva a energia do sistema e é compatível com o estabelecimento do efeito Kondo. Nesse caso a condutância atinge seu valor máximo  $G = \frac{2e^2}{h}$ . Os diferentes comportamentos dos estados ferro, de  $S_L \cong 1$ , e anti-ferro de  $S_L \cong 0$  faz da condutância a grandeza a ser utilizada no processo de leitura da informação quântica gravada no dispositivo.

O modelo de porta quântica que estamos propondo consiste em um dispositivo capaz de operar sobre um conjunto de dois qbits que, em nosso modelo, correspondem as projeções de spin dos PQ's laterais que podem se alinhar formando um estado ferro e outro anti-ferro, dependendo da ocupação do PQ central. No caso, vimos que o estado ferro de spin  $S_L \cong 1$  é concorrente com o regime Kondo e impede o transporte de elétrons através do sistema, com a destruição do estado Kondo no regime molecular quando  $t_{\alpha(\beta)} > t_{L(R)}$ . Por outro lado, observamos a possibilidade de coexistência entre o regime Kondo e o estado anti-ferro de spin  $S_L \cong 0$ . A presença ou não do regime Kondo se reflete diretamente na condutância medida entre os reservatórios, de modo que o resultado obtido para essa grandeza carrega consigo a informação referente à configuração ferro ou anti-ferro dos spins dos PQ's externos.

## 6.3

### Método dos bósons escravos

#### 6.3.1

##### Hamiltoniano

O sistema de PQ's que estamos propondo é descrito por um Hamiltoniano tipo Anderson, escrito como

$$\begin{aligned}
 H = & \sum_{\substack{i=\alpha,\beta,0 \\ \sigma}} \epsilon_i n_{i\sigma} + \sum_{i=\alpha,\beta,0} U_i n_{i\sigma} n_{i\bar{\sigma}} + \sum_{\substack{i=L,R \\ \sigma}} t_i (c_{i\sigma}^\dagger c_{0\sigma} + c_{0\sigma}^\dagger c_{i\sigma}) + \sum_{\substack{i=\alpha,\beta \\ \sigma}} t_i (c_{i\sigma}^\dagger c_{0\sigma} + c_{0\sigma}^\dagger c_{i\sigma}) + \\
 & + \sum_{\substack{i=-1 \\ \sigma}}^{-\infty} t (c_{i\sigma}^\dagger c_{i-1\sigma} + c_{i-1\sigma}^\dagger c_{i\sigma}) + \sum_{\substack{i=1 \\ \sigma}}^{\infty} t (c_{i\sigma}^\dagger c_{i+1\sigma} + c_{i+1\sigma}^\dagger c_{i\sigma}), \tag{6-15}
 \end{aligned}$$

onde  $c_{i\sigma}^\dagger (c_{i\sigma})$  é um operador que cria(destrói) um elétron de spin  $\sigma$  no sítio  $i$ . Ainda nesse Hamiltoniano os termos  $t_i$ , com  $i = \alpha, \beta, L, R$ , descrevem as conexões do PQ central com os reservatórios(L,R) e com os demais PQ's( $\alpha, \beta$ ), enquanto que  $\epsilon_i$  e  $U_i$ , com  $i = \alpha, 0, \beta$ , representam o estado local e a interação Coulombiana no  $i$ -ésimo PQ, respectivamente. Esse Hamiltoniano carrega consigo toda a informação física do sistema de três PQ's com o qual estamos trabalhando. Para extrair parte dessa informação, principalmente no que se refere as propriedades de transporte do sistema, aplicamos, como em toda esta tese, o método dos bósons escravos na aproximação de campo médio para  $U$  finito que foi discutido no segundo capítulo e que já aplicamos no estudo de sistemas mais simples, como no caso de um único PQ conectado a um reservatório de elétrons.

De acordo com o formalismo de bósons escravos introduzimos os operadores  $e_i$ ,  $p_{i\sigma}$  e  $d_i$ , bem como os multiplicadores de Lagrange  $\lambda_1^i$  e  $\lambda_{2\sigma}^i$  com  $i = \alpha, 0, \beta$  e, na aproximação de campo médio, escrevemos o Hamiltoniano acima como

$$\begin{aligned}
 H_{eff} = & \sum_{\substack{i=\alpha,\beta,0 \\ \sigma}} \epsilon_i c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma} + \sum_{i=\alpha,\beta,0} U_i \langle d_i \rangle^2 + \sum_{\substack{i=L,R \\ \sigma}} t_i Z_0 (c_{i\sigma}^\dagger c_{0\sigma} + c_{0\sigma}^\dagger c_{i\sigma}) + \\
 & + \sum_{\substack{i=\alpha,\beta \\ \sigma}} t_i Z_i Z_0 (c_{i\sigma}^\dagger c_{0\sigma} + c_{0\sigma}^\dagger c_{i\sigma}) + \sum_{\substack{i=-1 \\ \sigma}}^{-\infty} t (c_{i\sigma}^\dagger c_{i-1\sigma} + c_{i-1\sigma}^\dagger c_{i\sigma}) + \\
 & + \sum_{\substack{i=1 \\ \sigma}}^{\infty} t (c_{i\sigma}^\dagger c_{i+1\sigma} + c_{i+1\sigma}^\dagger c_{i\sigma}) + \sum_{\substack{i=\alpha,\beta,0 \\ \sigma}} \lambda_1^i (\langle e_i \rangle^2 + \langle p_{i\sigma} \rangle^2 + \langle d_i \rangle^2 - 1) + \\
 & + \sum_{\substack{i=\alpha,\beta,0 \\ \sigma}} \lambda_{2\sigma}^i (c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma} - \langle p_{i\sigma} \rangle^2 - \langle d_i \rangle^2), \tag{6-16}
 \end{aligned}$$

onde os parâmetros  $Z_0$  e  $Z_i Z_0$ , com  $i = \alpha, \beta$ , são definidos em termos dos bósons escravos, como descrito no capítulo 2, e responsáveis pela renormalização das conexões do PQ central com os reservatórios e com os PQ's laterais, respectivamente.

### 6.3.2

#### Sistema de equações não lineares

Considerando a simetria  $\alpha = \beta$  e  $L = R$  e minimizando a energia livre  $F$  em relação aos bósons e aos multiplicadores de Lagrange definidos para cada PQ obtemos um sistema de 10 equações não lineares que devem ser resolvidas autoconsistentemente. Elas são:

$$\begin{aligned} \frac{\partial F}{\partial \langle e_\alpha \rangle} &= \sum_{\sigma} t_{\alpha} Z_0 \frac{\partial Z}{\partial \langle e_\alpha \rangle} (\langle c_{\alpha\sigma}^{\dagger} c_{0\sigma} \rangle + \langle c_{0\sigma}^{\dagger} c_{\alpha\sigma} \rangle) + 2\lambda_1^{\alpha} \langle e_\alpha \rangle = 0 \\ \frac{\partial F}{\partial \langle p_{\alpha\sigma} \rangle} &= t_{\alpha} Z_0 \frac{\partial Z}{\partial \langle p_{\alpha\sigma} \rangle} (\langle c_{\alpha\sigma}^{\dagger} c_{0\sigma} \rangle + \langle c_{0\sigma}^{\dagger} c_{\alpha\sigma} \rangle) + 2(\lambda_1^{\alpha} - \lambda_{2\sigma}^{\alpha}) \langle p_{\alpha\sigma} \rangle = 0 \\ \frac{\partial F}{\partial \langle d_\alpha \rangle} &= \sum_{\sigma} t_{\alpha} Z_0 \frac{\partial Z}{\partial \langle d_\alpha \rangle} (\langle c_{\alpha\sigma}^{\dagger} c_{0\sigma} \rangle + \langle c_{0\sigma}^{\dagger} c_{\alpha\sigma} \rangle) + 2(U + \lambda_1^{\alpha} - \lambda_{2\sigma}^{\alpha} - \lambda_{2\bar{\sigma}}^{\alpha}) \langle d_\alpha \rangle = 0 \\ \frac{\partial F}{\partial \lambda_1^{\alpha}} &= \langle e_\alpha \rangle^2 + \sum_{\sigma} \langle p_{\alpha\sigma} \rangle^2 + \langle d_\alpha \rangle^2 - 1 = 0 \\ \frac{\partial F}{\partial \lambda_{2\sigma}^{\alpha}} &= \langle c_{\alpha\sigma}^{\dagger} c_{\alpha\sigma} \rangle - \langle p_{\alpha\sigma} \rangle^2 - \langle d_\alpha \rangle^2 = 0, \end{aligned}$$

enquanto que, em relação aos bósons e aos multiplicadores definidos para o PQ central,

$$\begin{aligned} \frac{\partial F}{\partial \langle e_0 \rangle} &= \sum_{\substack{i=L,R \\ \sigma}} t_i \frac{\partial Z_0}{\partial \langle e_0 \rangle} (\langle c_{i\sigma}^{\dagger} c_{0\sigma} \rangle + \langle c_{0\sigma}^{\dagger} c_{i\sigma} \rangle) + \sum_{\substack{i=\alpha,\beta \\ \sigma}} t_i Z \frac{\partial Z_0}{\partial \langle e_0 \rangle} (\langle c_{i\sigma}^{\dagger} c_{0\sigma} \rangle + \langle c_{0\sigma}^{\dagger} c_{i\sigma} \rangle) + 2\lambda_1^0 \langle e_0 \rangle = 0 \\ \frac{\partial F}{\partial \langle p_{0\sigma} \rangle} &= \sum_{i=L,R} t_i \frac{\partial Z_0}{\partial \langle p_{0\sigma} \rangle} (\langle c_{i\sigma}^{\dagger} c_{0\sigma} \rangle + \langle c_{0\sigma}^{\dagger} c_{i\sigma} \rangle) + \sum_{i=\alpha,\beta} t_i Z \frac{\partial Z_0}{\partial \langle p_{0\sigma} \rangle} (\langle c_{i\sigma}^{\dagger} c_{0\sigma} \rangle + \langle c_{0\sigma}^{\dagger} c_{i\sigma} \rangle) + \\ &+ 2(\lambda_1^0 - \lambda_{2\sigma}^0) \langle p_{0\sigma} \rangle = 0 \\ \frac{\partial F}{\partial \langle d_0 \rangle} &= \sum_{\substack{i=L,R \\ \sigma}} t_i \frac{\partial Z_0}{\partial \langle d_0 \rangle} (\langle c_{i\sigma}^{\dagger} c_{0\sigma} \rangle + \langle c_{0\sigma}^{\dagger} c_{i\sigma} \rangle) + \sum_{\substack{i=\alpha,\beta \\ \sigma}} t_i Z \frac{\partial Z_0}{\partial \langle d_0 \rangle} (\langle c_{i\sigma}^{\dagger} c_{0\sigma} \rangle + \langle c_{0\sigma}^{\dagger} c_{i\sigma} \rangle) + \\ &+ 2(U_0 + \lambda_1^0 - \lambda_{2\sigma}^0 - \lambda_{2\bar{\sigma}}^0) \langle d_0 \rangle = 0 \\ \frac{\partial F}{\partial \lambda_1^0} &= \langle e_0 \rangle^2 + \sum_{\sigma} \langle p_{0\sigma} \rangle^2 + \langle d_0 \rangle^2 - 1 = 0 \\ \frac{\partial F}{\partial \lambda_{2\sigma}^0} &= \langle c_{0\sigma}^{\dagger} c_{0\sigma} \rangle - \langle p_{0\sigma} \rangle^2 - \langle d_0 \rangle^2 = 0. \end{aligned}$$

Resolvendo esse sistema de equações obtemos autoconsistentemente os valores médios dos bósons escravos e dos multiplicadores de Lagrange responsáveis por levar o sistema ao regime Kondo. Os seis valores médios a serem calculados,  $\langle e_i \rangle$ ,  $\langle p_{i\sigma} \rangle$  e  $\langle d_i \rangle$ , com  $i = 0, \alpha(\beta)$ , aparecem na estrutura de  $Z_0$  e  $Z_i Z_0$ , que são responsáveis pela renormalização das conexões do PQ central com os reservatórios e com os PQ's laterais, respectivamente. O multiplicador  $\lambda_{2\sigma}^i$

é responsável por levar o sistema ao regime Kondo através da renormalização do nível de energia local nos PQ's, perto do nível de Fermi, enquanto que  $\lambda_1^i$  tem o papel de restringir aos valores de zero, um e dois elétrons a ocupação do  $i$ -ésimo PQ, como discutido no segundo capítulo. Do ponto de vista prático a natureza não linear do sistema introduz uma série de dificuldades associadas ao aparecimento de picos muito estreitos nas DOS dos PQ's laterais, o que dificulta o processo de integração numérica. Esse tipo de dificuldade nos limita a trabalhar numa região relativamente pequena do espaço dos parâmetros, principalmente no que se refere ao valor da interação Coulombiana  $U$ , que ficou limitada a um valor máximo de 0.65, e das conexões  $t_{\alpha(\beta)}$  do PQ central com os PQ's laterais que não podem ser muito pequenas quando comparadas com as conexões  $t_{L(R)}$  com os reservatórios.

#### 6.4 Funções de Green

Apresentamos abaixo as funções de Green que utilizamos nos cálculos auto-consistentes. No caso, adotamos  $\epsilon_\alpha = \epsilon_\beta$ , bem como  $t_\alpha = t_\beta$  e  $t_L = t_R$ , de modo a considerar uma simetria entre  $L - R$  e  $\alpha - \beta$ , reduzindo em número e tamanho as equações não lineares a serem resolvidas. As funções de Green locais obtidas para os PQ's laterais e central são dadas por

$$G_{\alpha\alpha}^\sigma = G_{\beta\beta}^\sigma = \frac{(1 - t_\beta^2 g_{0\sigma} g_{\beta\sigma} - t_L^2 g_{0\sigma} \tilde{g}_{L\sigma} - t_R^2 g_{0\sigma} \tilde{g}_{R\sigma}) g_{\alpha\sigma}}{1 - t_\alpha^2 g_{0\sigma} g_{\alpha\sigma} - t_\beta^2 g_{0\sigma} g_{\beta\sigma} - t_L^2 g_{0\sigma} \tilde{g}_{L\sigma} - t_R^2 g_{0\sigma} \tilde{g}_{R\sigma}} \quad (6-17)$$

e

$$G_{00}^\sigma = \frac{g_{0\sigma}}{1 - t_\alpha^2 g_{0\sigma} g_{\alpha\sigma} - t_\beta^2 g_{0\sigma} g_{\beta\sigma} - t_L^2 g_{0\sigma} \tilde{g}_{L\sigma} - t_R^2 g_{0\sigma} \tilde{g}_{R\sigma}}, \quad (6-18)$$

respectivamente. Já para as funções de Green não locais obtemos

$$G_{0\alpha}^\sigma = G_{0\beta}^\sigma = \frac{g_{0\sigma} t_\alpha g_{\alpha\sigma}}{1 - t_\alpha^2 g_{0\sigma} g_{\alpha\sigma} - t_\beta^2 g_{0\sigma} g_{\beta\sigma} - t_L^2 g_{0\sigma} \tilde{g}_{L\sigma} - t_R^2 g_{0\sigma} \tilde{g}_{R\sigma}} \quad (6-19)$$

e

$$G_{L0}^\sigma = G_{R0}^\sigma = \frac{\tilde{g}_L t_L g_0}{1 - t_\alpha^2 g_{0\sigma} g_{\alpha\sigma} - t_\beta^2 g_{0\sigma} g_{\beta\sigma} - t_L^2 g_{0\sigma} \tilde{g}_{L\sigma} - t_R^2 g_{0\sigma} \tilde{g}_{R\sigma}}. \quad (6-20)$$

Nestas expressões  $g_{0(\alpha)(\beta)\sigma}$  é a função de Green de um corpo definida para o PQ  $0(\alpha)(\beta)$  e  $\tilde{g}_{L(R)\sigma} = \frac{\omega \pm \sqrt{\omega^2 - 4t^2}}{2t^2}$  é a função de Green que descreve os contatos metálicos L(R) do sistema.



A integral da parte imaginária das funções vestidas,

$$\langle n_{ij} \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \text{Im}g(G_{ij}^{\sigma}(\omega)) f_L(\omega) d\omega, \quad (6-21)$$

onde  $i = 0, L, R, \alpha, \beta$ ,  $j = 0, \alpha, \beta$  e  $f_{L(R)}$  é a distribuição de Fermi dos reservatórios, que supomos em equilíbrio Termodinâmico, nos permite obter de forma auto-consistente os valores médios que aparecem no sistema de equações não lineares da seção anterior. Outra função de Green importante é a

$$G_{LR}^{\sigma}(\omega) = \frac{g_{L\sigma}^{\sim} t_L g_{0\sigma} t_R g_{R\sigma}^{\sim}}{1 - t_{\alpha}^2 g_{0\sigma} g_{\alpha\sigma} - t_{\beta}^2 g_{0\sigma} g_{\beta\sigma} - t_L^2 g_{0\sigma} \tilde{g}_{L\sigma} - t_R^2 g_{0\sigma} \tilde{g}_{R\sigma}}, \quad (6-22)$$

a partir da qual podemos calcular a condutância do sistema,

$$G(E_{fermi}) = -\frac{1}{2\pi} t^4 |G_{LR}^{\sigma}(E_{fermi})|^2, \quad (6-23)$$

onde  $E_{fermi}$  é o nível de Fermi nos reservatórios.

## 6.5 Resultados

Esta seção é dedicada ao estudo do comportamento físico do sistema em diferentes regimes. Mais especificamente apresentamos os resultados que obtivemos para a condutância, a densidade de estados local nos PQ's e os parâmetros  $Z_0$  e  $ZZ_0$ , responsáveis por renormalizar as conexões do PQ central com os PQ's laterais e com os contatos, respectivamente. Esses resultados são obtidos para diferentes conexões, temperaturas, e valores do potencial de porta aplicado ao PQ central.

Na figura 6.8 apresentamos um estudo a  $T = 0$  mostrando o comportamento da DOS do PQ central para diferentes valores das conexões  $t_{\alpha(\beta)}$  com os PQ's laterais. Este resultado é obtido com os potenciais de porta ajustados na posição de simetria partícula-buraco  $Vg_0 = Vg_{\alpha} = Vg_{\beta} = -U/2$ , com  $U = 0.65$  e mostra uma mudança no comportamento do sistema que, com o aumento dessa conexão, passa de um estado característico de um regime Kondo de dois estágios  $t_{\alpha(\beta)} < t_{L(R)}$  (17) a um estado molecular não Kondo  $t_{\alpha(\beta)} \geq t_{L(R)}$  (17). A anti-ressonância observada na DOS do PQ central e o afastamento entre os estados ligado e não-ligado, característico do regime molecular, impossibilitam o transporte de elétrons através do PQ central da estrutura, que se comporta como um isolante. Veremos a seguir que, com o aumento da tem-

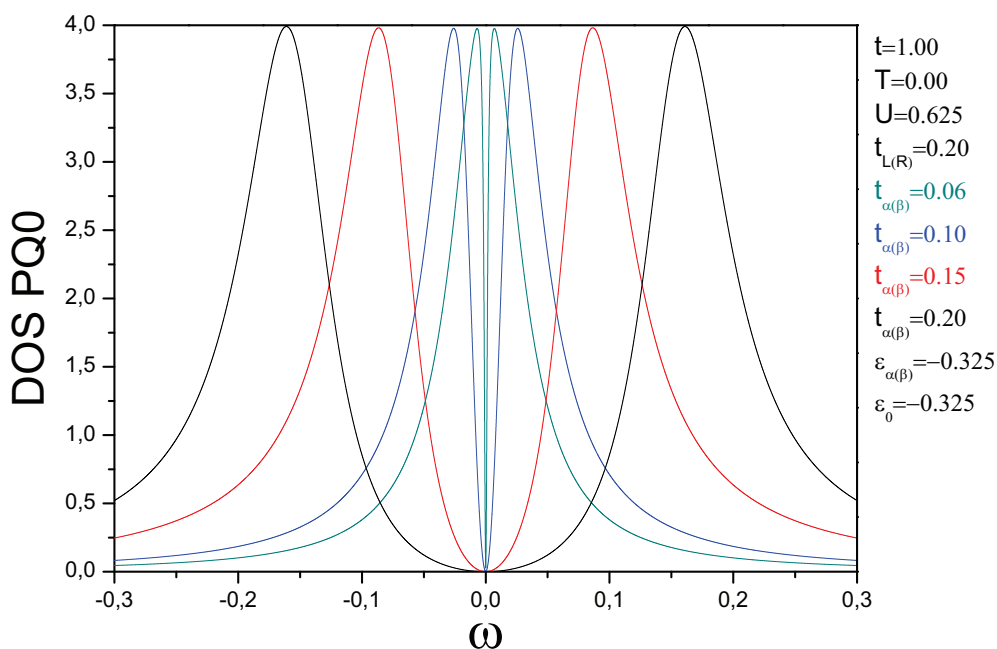


Figura 6.8: A figura apresenta as DOS's calculadas no PQ central para diferentes valores das conexões com os PQ's laterais . O resultado é obtido em  $T=0$  e com o potencial de porta nos PQ's ajustado na posição de simetria  $Vg_i = -U/2$ , com  $i = 0, \alpha, \beta$  e  $U = 0.65$ .

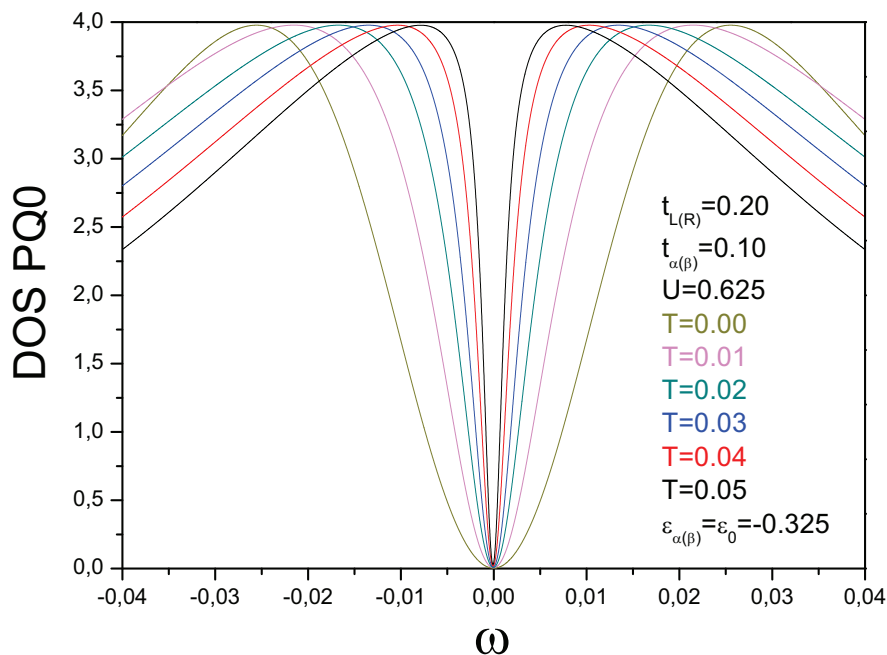


Figura 6.9: A figura apresenta a DOS calculada no PQ central para diferentes valores de temperatura. O potencial de porta aplicado nos PQ's foram ajustado na posição de simetria  $Vg_i = -U/2$ , com  $i = 0, \alpha, \beta$  e  $U = 0.65$ .

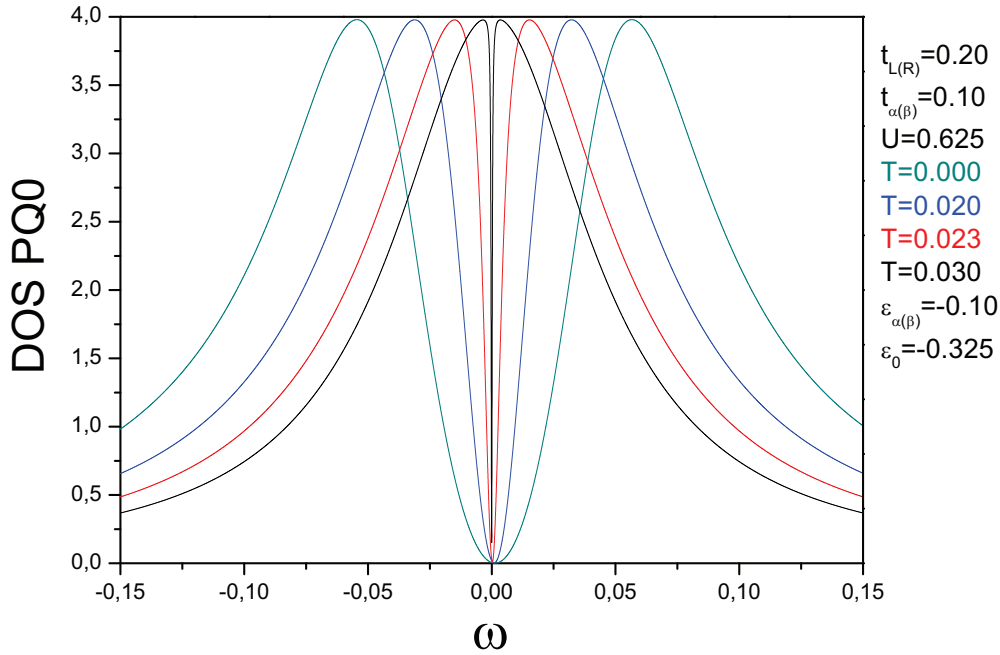


Figura 6.10: A figura apresenta a DOS calculada no PQ central para diferentes valores de temperatura. O potencial de porta aplicado nos PQ's foram ajustados de forma que  $e_\alpha = e_\beta = -0.1$  e  $e_0 = -0.325$ , dessa vez fora da região de simetria partícula buraco.

peratura no regime Kondo o primeiro estágio é destruído e o sistema passa a conduzir. Por outro lado veremos que a mudança na temperatura interfere muito pouco nas propriedades de transporte através do sistema quando o mesmo se encontra num regime molecular confirmando que o sistema está fora do regime Kondo. Neste caso não existe uma temperatura característica  $T_K$  por cima da qual as propriedades do sistema, incluindo a condutância, mudam radicalmente como acontece quando o sistema está no regime Kondo. Nesse caso o transporte de elétrons permanece proibido independentemente da temperatura. Nesta configuração a estrutura de PQ's possui três elétrons e a correlação entre os PQ's laterais é ferromagnética (23).

As figuras 6.9 e 6.10 mostram a influência da temperatura nas DOS's dos PQ's obtidas com o potencial de porta do PQ central  $Vg_0$  ajustado na posição de simetria partícula buraco  $-U/2$  e os potenciais de porta dos PQ's laterais  $Vg_\alpha$  e  $Vg_\beta$  em duas diferentes regiões do espaço das energias. No primeiro caso também colocamos esses potenciais em  $-U/2$  enquanto que no segundo o sistema é considerado fora da simetria, com  $Vg_\alpha = Vg_\beta = -0.1$ . Ambos os resultados mostram claramente o sistema num regime Kondo de dois estágios (17), com temperaturas características  $T_{K1}$  e  $T_{K2}$  ( $T_{K1} \gg T_{K2}$ ) que representam, respectivamente, o primeiro e o segundo estágio do regime. A largura da DOS do PQ central corresponde à primeira temperatura Kondo  $T_{K1}$

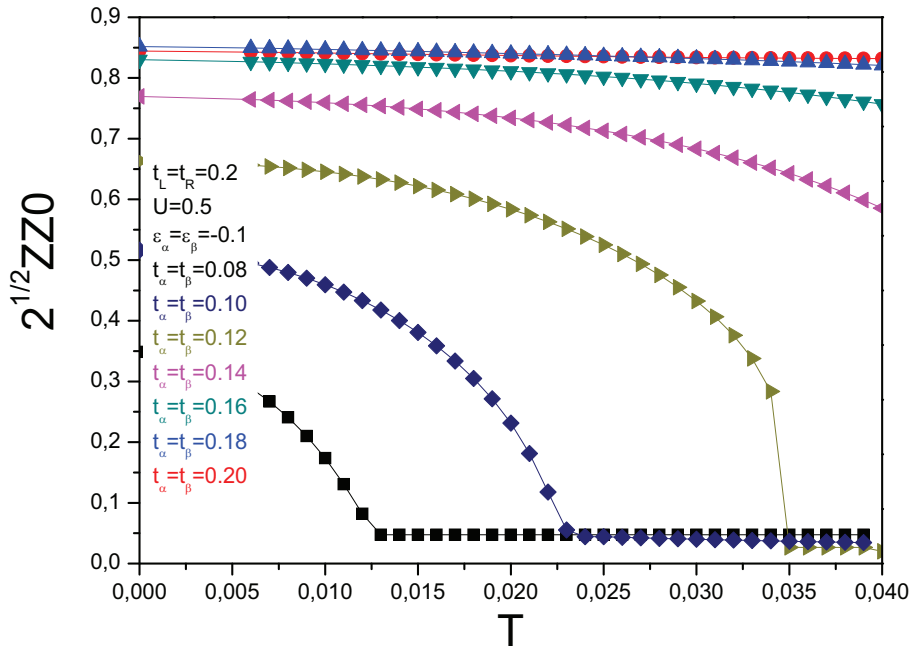


Figura 6.11: A figura mostra o comportamento com a temperatura do parâmetro  $ZZ_0$  introduzido no contexto do formalismo dos bósons escravos e que é responsável por renormalizar a conexão com os PQ's laterais. Esse parâmetro é estudado com o sistema em diferentes regimes, definidos pela magnitude da conexão  $t_{\alpha(\beta)}$ .

enquanto que a largura da anti-ressonância observada nessa DOS, ou mesmo as larguras das DOS's calculadas para os PQ's laterais, como mostramos na figura 6.15 correspondem a  $T_{K2}$ .

Observamos que o aumento da temperatura do sistema destrói o segundo estágio do regime Kondo com o desaparecimento da anti-ressonância da DOS do PQ central na região próxima ao nível de Fermi. Vimos também, que o desaparecimento dessa anti-ressonância é acompanhado de um estreitamento na DOS dos PQ's laterais e que esse processo é mais intenso com o sistema fora da posição de simetria, que é o caso da figura 6.10. A transição do sistema de um regime Kondo de dois estágios para um regime Kondo de um estágio com o aumento da temperatura  $T > T_{K2}$  permite a existência de estados no PQ central perto do nível de Fermi através dos quais os elétrons podem circular e, conseqüentemente, o tunelamento de elétrons entre os reservatórios. Como podemos observar, a partir do resultado da figura 6.11, esse comportamento se reflete no formalismo dos bósons escravos através da influência da temperatura no parâmetro  $ZZ_0$  que conforme mencionamos em 6.3.2, é responsável pela renormalização das conexões com os PQ's laterais. O resultado apresenta um

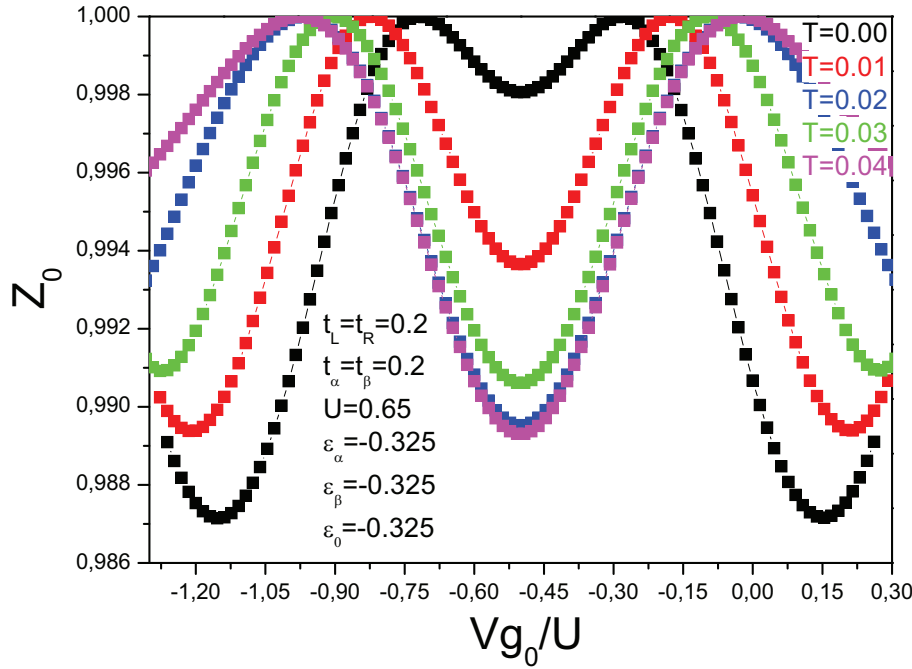


Figura 6.12: A figura mostra para diferentes temperaturas o comportamento de  $Z_0$  em função do potencial de porta aplicado ao PQ central. Esse parâmetro é responsável por renormalizar a conexão do PQ central com os reservatórios. Este resultado é obtido com os potenciais de porta dos PQ's externos ajustados em  $-U/2$ , com  $U = 0.65$ .

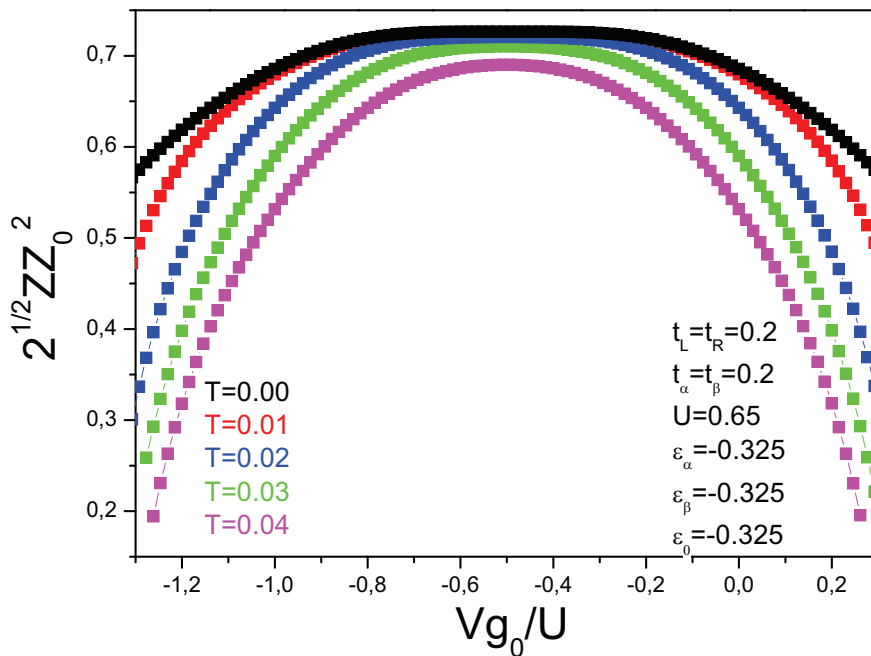


Figura 6.13: A figura mostra para diferentes temperaturas o comportamento de  $ZZ_0$  em função do potencial de porta aplicado ao PQ central. Esse parâmetro é responsável por renormalizar a conexão entre o PQ central e os PQ's laterais. Esse resultado é obtido com os potenciais de porta dos PQ's externos ajustados em  $-U/2$ , com  $U = 0.65$ .

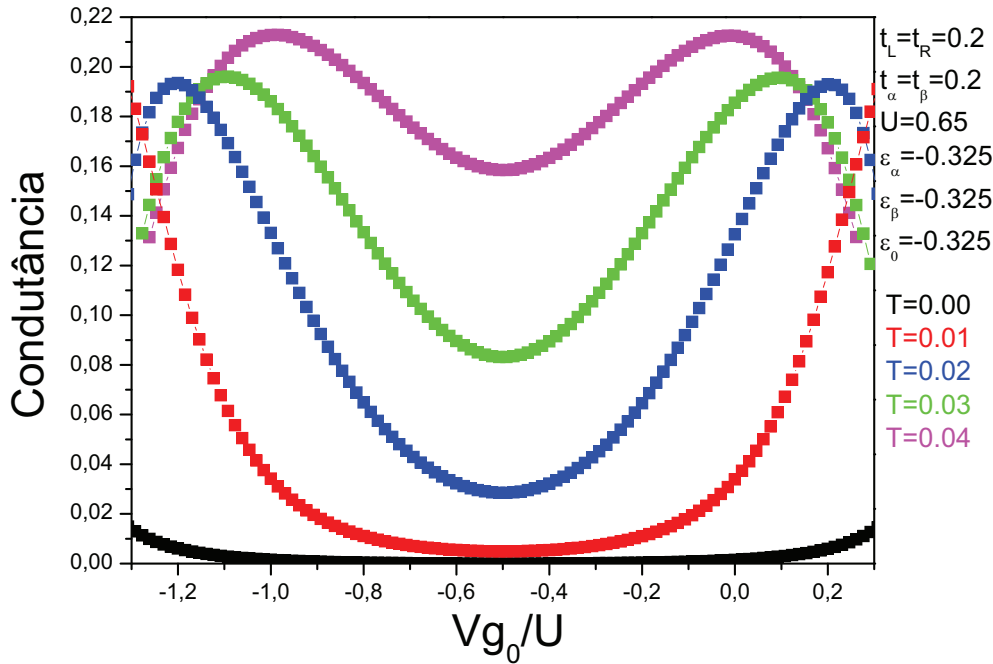


Figura 6.14: A figura mostra para diferentes valores de temperatura o comportamento da condutância em função do potencial de porta aplicado na base do PQ central. Esse resultado é obtido com os potenciais de porta ajustados  $-U/2$ , com  $U = -0.65$ , de forma a deixar o sistema na posição de simetria partícula buraco.

estudo desse parâmetro em função da temperatura para um potencial de porta aplicado aos PQ's de modo a deixar  $\epsilon_{\alpha(\beta)} = -0.1$ . Este valor permite estudar de uma forma clara o comportamento com a temperatura do sistema do regime Kondo de dois estágios ao regime molecular não Kondo conforme aumentamos o valor de  $t_{\alpha(\beta)}$ . No que se refere as conexões com os PQ's laterais observamos que, para  $t_{\alpha(\beta)} \leq 0.14$ , o parâmetro  $ZZ_0$  vai rapidamente a zero com o aumento da temperatura, desconectando os PQ's laterais. Esse desacoplamento reflete a transição do sistema que passa de um regime Kondo de dois estágios para um regime Kondo de um estágio. Já para valores de  $t_{\alpha(\beta)} > 0.14$  o sistema é encontrado num estado molecular que se apresenta praticamente invariante com o aumento da temperatura.

Na figura 6.13 apresentamos um estudo de  $ZZ_0$  em função do potencial de porta  $Vg_0$  aplicado no PQ central para diferentes valores de temperatura. De fato, observamos nesse resultado que entre  $Vg_0 = -0.2$  e  $Vg_0 = -0.8$ , regiões em torno da simetria  $Vg_0/U = -0.5$ , com  $U = 0.65$ , a mudança com a temperatura é quase zero refletindo que o sistema para estes parâmetros está no regime molecular. Já para valores mais afastados dessa região o termo  $ZZ_0$  fica bastante sensível com a temperatura, o que se reflete na transição para o regime Kondo de um estágio. Esta dependência com a temperatura não

aparece no  $Z_0$ , responsável por renormalizar a conexão do PQ central com os contatos. O resultado da figura 6.12 mostra que esse parâmetro é praticamente independente da temperatura quando  $t_{\alpha(\beta)} \sim t_{L(R)}$  independente do potencial de porta  $V_{g_0}$ .

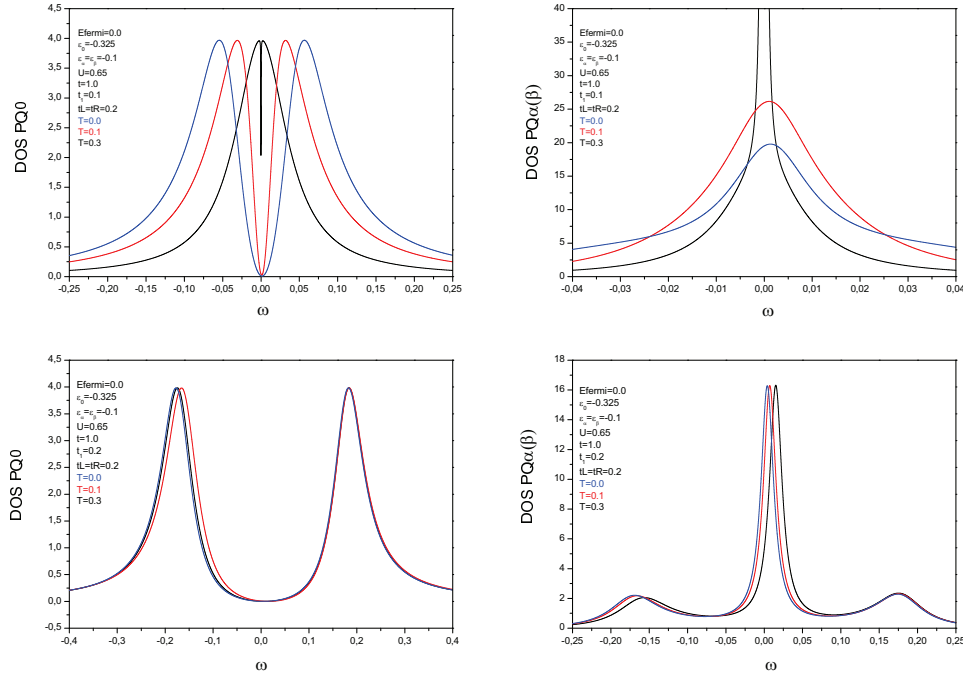


Figura 6.15: A figura mostra a variação com a temperatura da densidade de estados no PQ's 0,  $\alpha$  e  $\beta$  calculada para o sistema em dois regimes diferentes. Em (A) o sistema apresenta uma anti-ressonância na DOS do PQ 0 caracterizando um efeito Kondo de dois estágios enquanto que em (B) o sistema apresenta dois picos que caracterizam o estado molecular. Vimos em (A) que o aumento da temperatura é responsável por recompor o buraco na DOS do PQ central, destruindo a anti-ressonância característica do efeito Kondo de dois estágios e provocando uma transição isolante-metal no regime do sistema. Em (B) vimos que, no regime molecular, o sistema permanece completamente insensível com o aumento da temperatura.

Num estudo mais detalhado apresentamos em 6.15 as DOS's dos PQ's em dois regimes diferentes, ambos obtidos com o sistema fora da posição de simetria. Em (A), para um valor relativamente pequeno das conexões laterais, observamos que em  $T = 0$  o sistema se encontra num estado característico de um regime Kondo de dois estágios. Nesse caso, o aumento gradativo da temperatura reconstitui a anti-ressonância observada na DOS do PQ central, destruindo o primeiro estágio do regime Kondo, com temperatura  $T_{k1}$ , e levando o sistema a um regime que possibilita a condução de elétrons. Quanto aos PQ's laterais, observamos um pico de largura associada a  $T_{K2}$  e um

rápido estreitamento dele conforme a temperatura aumenta. Em (B) o sistema é considerado no regime molecular em  $T = 0$  com um valor relativamente grande para as conexões laterais. Os resultados mostram que esse regime em nada se altera com o aumento da temperatura, ficando as DOS, tanto do PQ central como dos laterais, pouco alteradas com a temperatura. O comportamento observado pelo sistema nas duas situações que descrevemos reflete o comportamento das curvas que obtivemos para  $ZZ_0$  na figura 6.11. Observamos nesse resultado que para  $t_{\alpha(\beta)} = 0.1$  o aumento da temperatura provoca um decréscimo acentuado em  $ZZ_0$ , diminuindo a conexão com os PQ's laterais e levando o sistema a um regime Kondo de um estágio. Já para  $t_{\alpha(\beta)} = 0.2$  observamos que o aumento da temperatura praticamente não modifica  $ZZ_0$  impossibilitando uma transição de regime.

A dependência com a temperatura e com o valor do potencial de porta aplicado em cada PQ, no que se refere aos parâmetros introduzidos pelo método dos bósons escravos e que renormalizam as conexões, está diretamente associada as propriedades de transporte do sistema e se reflete diretamente na condutância conforme apresentamos na figura 6.14. Adotamos um valor de  $t_{\alpha(\beta)} > t_{L(R)}$  para que o sistema esteja num regime molecular de forma que a condutância fora da ressonância é praticamente zero independente da temperatura. Como já discutimos anteriormente esta é a situação na qual os PQ's externos estão acoplados ferromagneticamente e o sistema está fora do regime Kondo. Para este sistema a medição de uma condutância zero é uma forma de identificar que o sistema está com acoplamento ferro, e uma maneira de ler a informação contida nos spins. Para este mesmo sistema, um estado com correlação anti-ferro entre os spins externos teria dado, como já discutimos qualitativamente, um resultado oposto para a condutância, já que neste caso o sistema está no regime Kondo criando um canal para os elétrons circularem pelo dispositivo. Este resultado pode ser obtido facilmente acrescentando uma pequena interação anti-ferro  $J = S_\alpha S_\beta$  com  $J > 0$  o que permitiria estabilizar o estado antiferro como o estado fundamental do sistema. Embora este cálculo não tenha sido feito utilizando o método dos bósons escravos, mostramos na figura 6.7 o resultado da condutância utilizando o método LDECA (23), conformando que neste caso a condutância é  $G = \frac{2e^2}{h}$  e mostrando claramente que uma medida da condutância nos permite ler a informação contida no sistema diferenciando claramente as correlações ferro e anti-ferro entre os spins externos.



## 6.6

### Conclusões

Neste capítulo mostramos que um sistema de três pontos quânticos acoplados linearmente entre si e com o central conectado a contatos metálicos possui uma física muito rica. Dependendo do valor de seus parâmetros pode estar num regime Kondo de um estágio, ou de dois estágios com propriedades totalmente dependentes da temperatura, ou num regime molecular praticamente independente desta grandeza. Cada um destes regimes refletem acoplamentos diferentes entre os spins laterais. Como a correlação entre eles pode ser ferromagnética ou anti-ferromagnética dependendo do estado de carga do ponto quântico central que pode ser controlado manipulando o potencial de porta  $V_{g_0}$  este sistema é um forte candidato a atuar como uma porta lógica quântica. Por outro lado demonstramos também que a leitura do conteúdo da informação da porta quântica pode ser facilmente realizada medindo a condutância do sistema que depende, devido ao efeito Kondo, fortemente da correlação entre os spins.