

7

Conclusões e perspectivas

Nesta tese utilizamos o formalismo dos bósons escravos na aproximação de campo médio para investigar as propriedades eletrônicas e de transporte em nanoestruturas de pontos quânticos. Em particular estudamos a física associada ao estabelecimento do regime Kondo em sistemas com um, dois e três PQ's interagentes que são conectados entre si e a contatos metálicos formando moléculas artificiais com diferentes topologias. Investigamos a potencialidade destas estruturas para serem utilizadas não apenas como plataforma de estudo para as diferentes variações do regime Kondo e de outro tipo de correlações mas também para funcionar como um dispositivo capaz de armazenar e processar a informação quântica contida na orientação dos spins dos PQ's interagentes. Esta perspectiva abre caminho para o desenvolvimento de uma porta lógica quântica, elemento fundamental para a construção do que seria o processador de um computador quântico.

A primeira estrutura considerada consiste de um PQ com interação Coulombiana U conectado a um reservatório de elétrons. Este é um sistema extensamente estudado e tem como único objetivo apresentar o método dos bósons escravos e descrever a forma de como a física Kondo é incorporada ao sistema através deste método. No contexto de uma aproximação de campo médio descrevemos o comportamento do multiplicador de Lagrange $\lambda_{2\sigma}$, responsável por renormalizar a energia do estado local ϵ_α no PQ interagente, e dos operadores bosônicos e_i , $p_{i\sigma}$ e d_i que projetam o sistema num estado ocupado com zero, um e dois elétrons e que estão associados a renormalização da conexão t_L com o reservatório através do parâmetro Z . Enfatizamos a importância do método dos bósons escravos na aproximação de campo médio no sentido de que este pode ser aplicado a sistema mais complexos de vários PQ's e, embora não considerado nesta tese, a situações fora de equilíbrio termodinâmico, fornecendo resultados excepcionalmente acurados e comparáveis quantitativamente com resultados exatos. É fundamental destacar que o formalismo é aplicado para uma situação onde a interação Coulombiana local é finita. Isto é de grande importância porque nos permite, de uma maneira natural, estudar a concorrência entre o efeito Kondo e as correlações magnéticas entre os

spins de uma estrutura de PQ's que no limite $U \rightarrow \infty$, muito usado na literatura, são eliminadas. Esta é a física que analisamos nesta tese, permitindo que o problema seja estudado de uma forma adequada sem acrescentar termos espúrios no Hamiltoniano, que não existem, e que são incorporados para recriar os efeitos magnéticos que o limite de $U \rightarrow \infty$ elimina. A simplicidade formal do método é proveniente do fato que o problema de muitos corpos é reescrito como o problema de um corpo. As dificuldades são derivadas das múltiplas variáveis auto-consistentes que devem ser resolvidas, o que implica num desafio numérico nada desprezível.

Também utilizamos o sistema de um PQ para estudar, na densidade de estados, a forma na qual o pico Kondo existente na impureza se propaga nos contatos metálicos. Mostramos que esta perturbação está associada a existência de uma nuvem chamada nuvem Kondo que se estende no interior destes contatos e cuja extensão ξ se relaciona com a temperatura Kondo T_K do sistema através da expressão $\xi = \alpha/T_K$, onde α é uma constante. Este é um conceito que não está ainda bem estabelecido na literatura e não existe, que saibamos, nenhum resultado experimental que confirme sua pertinência. Descrevemos toda uma metodologia para o cálculo da extensão ξ desta nuvem e para a obtenção de um valor estimado para a temperatura Kondo T_K do sistema baseado no cálculo da DOS no interior dos contatos. Comparando as DOS obtidas para o sistema dentro e fora do regime Kondo, propomos uma função $F(N)$ (onde N é o sítio da semi-cadeia infinita que representa o contato, medido a partir de sua borda) através da qual podemos extrair a extensão da nuvem Kondo. Para descrever a DOS fora do regime Kondo ($T > T_k$) utilizamos a solução Hubbard I¹. O resultado mais importante que obtivemos neste estudo foi verificar que a função $F(N)$ define uma distância característica ξ , de caráter universal, que só depende da temperatura Kondo T_k que satisfaz $\xi = \alpha/T_k$, onde $\alpha \cong 0.65$ para um PQ. Verificamos a concordância de nossos resultados com os obtidos através de dois outros métodos. No caso o método do aglomerado embebido ECA e do grupo de renormalização numérica NRG, ambos descritos nesta tese.

7.1

Molécula de dois PQ's

Estendemos o tratamento do problema Kondo a uma molécula de dois PQ's interagentes α e β . Embora este seja um problema extensamente estudado na literatura existem aspectos dele não bem entendidos. As fronteiras

¹No tratamento de sistemas mais complexos aproveitamos uma propriedade do método dos bósons escravos que desconecta a impureza para $T \gg T_k$ para compararmos as soluções Kondo ρ^K e não Kondo ρ^{nK} na construção da função $F(N)$.

entre o regime Kondo molecular de um elétron e o regime de concorrência entre o anti-ferromagnetismo e o efeito Kondo de dois elétrons é um deles. O outro é a constituição da nuvem Kondo e a partir dela como T_k depende dos parâmetros do sistema. Na molécula, cada PQ é ligado a um contato metálico e ao outro PQ através das conexões $t_{L(R)}$ e $t_{\alpha\beta}$, respectivamente. Como já mencionado a descrição da física Kondo neste sistema através do método dos bósons escravos a U finito não elimina a correlação de spin $J = t_{\alpha\beta}^2/U$ entre os PQ's interagentes permitindo estudar o processo de competição entre esta correlação e o regime Kondo formado pelo acoplamento com os spins dos elétrons de condução dentro dos contatos. Esse processo é regido pela concorrência entre duas escalas de energia características, a interação J e a temperatura Kondo T_K do sistema.

A natureza do regime quântico instalado no sistema de dois PQ's pode ser controlada ajustando a magnitude das conexões $t_{L(R)}$ e $t_{\alpha\beta}$ associadas, respectivamente, as duas escalas de energias que acabamos de comentar e a posição do estado local nos PQ's através de um potencial de porta $Vg_{\alpha(\beta)}$ aplicado na base destes PQ's. Para identificar estes regimes e entender algumas de suas propriedades básicas estudamos o comportamento de algumas grandezas como a condutância G , o nível renormalizado $\tilde{\epsilon}_{\alpha\beta}$ e o parâmetro Z , responsável por renormalizar as conexões entre as diferentes partes do sistema, em função do potencial de porta $Vg_{\alpha(\beta)}$ e para diferentes magnitudes da conexão $t_{\alpha\beta}$ entre os PQ's. Obtivemos a partir dos resultados que o sistema pode se apresentar em três diferentes regimes, que dependem da carga total e da magnitude de suas conexões. Para o sistema com dois elétrons verificamos a presença do regime Kondo quando $t_{\alpha\beta}$ é relativamente pequeno. Aumentando a magnitude desta conexão obtivemos a destruição deste regime e a transição do sistema a um estado molecular não Kondo de dois elétrons. Verificamos ainda na região de um e três elétrons a existência de um estado Kondo molecular. Caracterizamos a presença deste estado através dos platôs formados em $\tilde{\epsilon}_{\alpha\beta} = \pm \tilde{t}_{\alpha\beta}$ para valores relativamente grandes de $t_{\alpha\beta}$ e da condutância que atinge um valor próximo de seu máximo, $G \approx 1.0$, na região de $Vg_{\alpha(\beta)}$ onde ocorrem estes platôs. Obtivemos uma solução exata para o sistema desacoplado dos reservatórios. Esta solução nos auxiliou no sentido de identificar para um determinado valor de $t_{\alpha\beta}$ a região de $Vg_{\alpha(\beta)}$ onde ocorrem as flutuações de carga e os processos associados a transição do sistema de um regime quântico a outro.

Calculamos as DOS dentro dos contatos no processo de transição entre o regime Kondo e a interação anti-ferro na região de dois elétrons e obtivemos a função $F(N)$ para diferentes valores da conexão $t_{\alpha\beta}$ entre os PQ's. Observamos

que esta função apresenta um comportamento oscilatório que é envolto por uma exponencial e que resulta do acoplamento direto entre os PQ's através de $t_{\alpha\beta}$. Obtivemos a extensão ξ_i da nuvem Kondo e, conseqüentemente, a temperatura Kondo T_K do sistema através da inclinação da reta tangente as funções $\ln F(N)$ que obtivemos para diferentes valores de $t_{\alpha\beta}$. Os resultados mostraram que a temperatura Kondo do sistema aumenta com a magnitude desta conexão, apresentando um comportamento exponencial e que reflete, com a diminuição de ξ_i , a destruição da nuvem Kondo dentro dos reservatórios como consequência da interação $J = t_{\alpha\beta}^2/U$ entre os spins dos PQ's interagentes quando aumentamos $t_{\alpha\beta}$. Ainda no sistema de dois PQ's realizamos um estudo a temperatura finita. Neste estudo aproveitamos a propriedade do método dos bósons escravos de desacoplar o sistema quando sua temperatura atinge um determinado valor $T = T_c$, que chamamos de temperatura de corte e que, para pequenos valores da conexão $t_{\alpha\beta}$, é idêntica a temperatura Kondo obtida a partir da extensão da nuvem Kondo. Nesta região de $t_{\alpha\beta}$, o regime Kondo se encontra bem caracterizado e tanto T_c quanto T_K apresentam um comportamento exponencial em função de $t_{\alpha\beta}$.

7.2

Molécula de três pontos quânticos

Apresentamos uma molécula de três PQ's com dois PQ's interagentes α e β interligados indiretamente através de uma conexão t_0 com um terceiro PQ não interagente. Nesta molécula cada PQ interagente é conectado a um contato metálico através da conexão $t_{L(R)}$ formando uma estrutura em série. Estudamos as propriedades do sistema em função da posição do nível ϵ_0 do estado local do PQ 0 para diferentes valores da conexão t_0 com este PQ, supondo $Vg_{\alpha(\beta)} = -U/2$.

Obtivemos resultados para o nível renormalizado $\tilde{\epsilon}_{\alpha(\beta)}$ do PQ $\alpha(\beta)$, a condutância, a carga no PQ central e para o parâmetro Z que renormaliza as conexões do sistema. Também foram estudadas as grandezas em função de $Vg_{\alpha(\beta)}$ quando ϵ_0 é fixado em $\epsilon_0 = 0$. Analisando estes resultados identificamos na região de três elétrons a coexistência do regime Kondo com a correlação tipo ferro entre os spins dos elétrons nos PQ's interagentes independente da magnitude de t_0 . Na região de dois(ou quatro) elétrons observamos a natureza da interação anti-ferro que concorre com o estado Kondo. A orientação tipo ferro ou anti-ferro entre os spins dos PQ's interagentes para o sistema ocupado com três e duas(ou quatro) partículas, respectivamente, é melhor entendido pelos resultados que obtivemos de forma exata para o sistema desacoplado dos reservatórios e confirmada através do cálculo das correlações de spins

para o sistema completo realizadas utilizando o método LDECA². Estas duas soluções nos ajudaram a localizar as regiões onde ocorrem as flutuações de carga associadas a transição do sistema de um regime em que os spins nos PQ's interagentes se orientam de forma paralela e anti-paralela.

Os resultados que obtivemos para a molécula de três PQ's com spins em sítios interagentes α e β acoplados com um spin de condução no PQ central, não interagente, são importantes pois esclarecem que a correlação ferro é compatível com o regime Kondo e a anti-ferro é concorrente e tende a destruir este regime.

7.3

Sistema de três pontos quânticos como porta quântica

Na parte final desta tese estudamos uma molécula de três PQ's interagentes, α , 0 e β . Os PQ's α e β são conectados ao PQ central 0 através de uma conexão $t_{\alpha(\beta)}$. Este, por sua vez, é conectado a dois contatos metálicos através da conexão $t_{L(R)}$ formando uma estrutura de três PQ's em paralelo. Nós mostramos que este dispositivo é capaz de armazenar e processar a informação quântica contida no sinal da correlação magnética entre os spins dos PQ's α e β . Obtivemos que a natureza desta correlação depende da ocupação do PQ 0, sendo ferro quando este PQ é ocupado com um elétron e anti-ferro quando se encontrar vazio. Diferente do que obtivemos para a configuração em série, neste sistema a orientação anti-ferro entre os spins laterais é compatível com a instalação do regime Kondo e a orientação ferro é que concorre e eventualmente destrói este regime para valores relativamente grandes das conexões $t_{\alpha(\beta)}$ com os PQ's laterais. A presença ou não do regime Kondo no sistema está associada a natureza ferro ou anti-ferro da orientação relativa entre os spins dos PQ's laterais, informação esta que poderia ser obtida medindo-se a condutância, que é $G \approx 0.0$ no primeiro caso e $G \approx 1.0$ no segundo.

Para $t_{\alpha(\beta)}/t_{L(R)} < 1$ obtivemos um regime Kondo de dois estágios caracterizado por duas temperaturas Kondo, T_{k1} e T_{k2} , com $T_{k2} < T_{k1}$. Estas temperaturas foram identificadas com a largura da anti-ressonância no nível de Fermi e da própria largura da DOS calculada no PQ central. Aumentamos a temperatura T do sistema e obtivemos a destruição do segundo estágio do regime Kondo, com a recomposição da DOS no PQ central. Obtivemos com isso a transição do sistema ao estado Kondo de um estágio que permite o transporte de elétrons entre os contatos. Como consequência a condutância do sistema atinge um valor próximo do seu máximo em $G \approx 1.0$. Aumentando a magnitude das conexões $t_{\alpha(\beta)}$ com os PQ's laterais observamos a transição do

²Cálculos providenciados pelo professor George Martins, Oakland University.

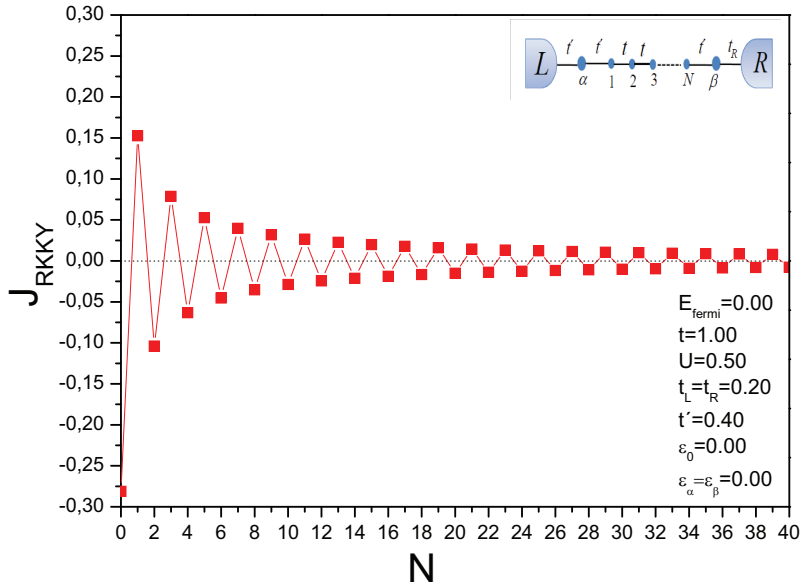


Figura 7.1: A figura mostra o comportamento oscilatório da interação RKKY em função do número N de sítios não interagentes da cadeia de PQ's colocada entre α e β . Este resultado foi obtido com $K_f = \pi/2$, valor que corresponde ao sistema com o nível de Fermi em zero.

sistema do regime Kondo de dois estágios ($t_{\alpha(\beta)} < t_{L(R)}$) ao regime molecular ($t_{\alpha(\beta)} > t_{L(R)}$), que fica inalterado com o aumento da temperatura e que consiste no regime adequado para o funcionamento desta estrutura como uma porta lógica quântica, tanto no processo quântico intrínseco da operação da porta como a leitura da sua informação.

7.4 Perspectivas futuras

As informações e ferramentas conceituais desenvolvidas no estudo do sistema de três PQ's em série, com dois PQ's interagentes, α e β , conectados de forma indireta através de um terceiro PQ não interagente 0, abrem caminho para um estudo mais completo da interação RKKY (77, 78), J_{RKKY} , quando uma cadeia de sítios não interagentes é colocada entre α e β . Este estudo permitirá entender as propriedades de transporte de dois PQ's em função da distância entre eles, da intensidade da interação e da posição do nível de Fermi. Esta disposição experimental, a mais simples possível, é a que no nosso ponto de vista permitiria uma medida direta da interação RKKY através de seus efeitos na condutância. A natureza da nuvem Kondo entre os PQ's, permitiria esclarecer aspectos do fenômeno Kondo que tem sido elusivos até o momento (Affleck, Siminin, Busser). Neste estudo a natureza ferro ou anti-ferro da correlação entre os spins destes PQ's, como já mencionamos, está relacionada ao número N de sítios da cadeia e a posição da energia de Fermi

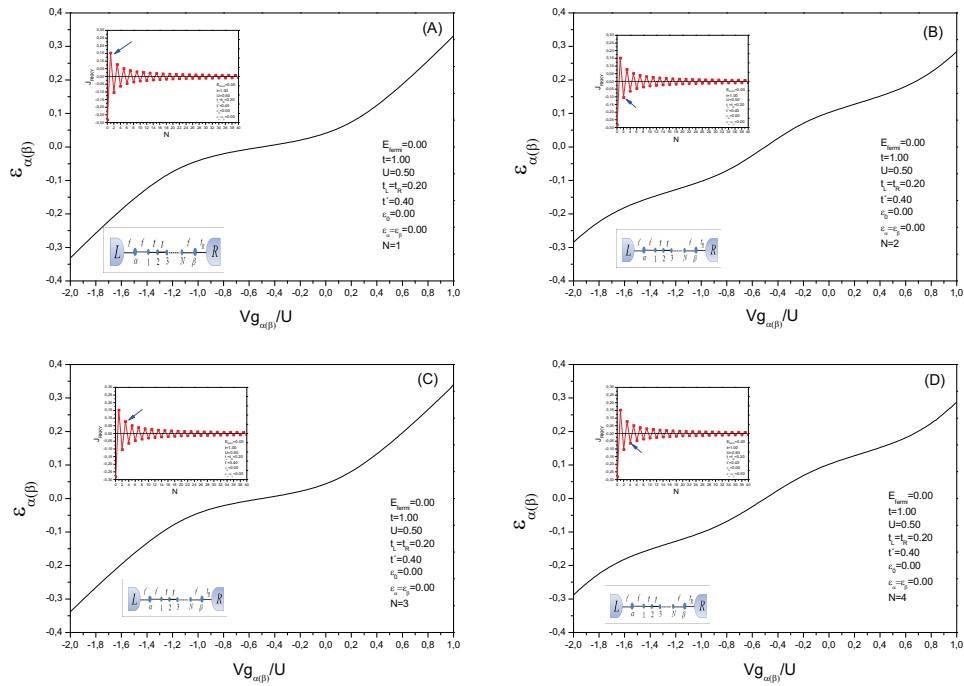


Figura 7.2: A figura mostra o comportamento do nível renormalizado $\tilde{\epsilon}_{\alpha(\beta)}$ em função do potencial de porta $Vg_{\alpha(\beta)}$ aplicado na base dos PQ's interagentes para o sistema com uma cadeia central de quatro diferentes tamanhos. Para os quadros (A), (B), (C) e (D) o comprimento da cadeia central e de $N = 1$, $N = 2$, $N = 3$ e $N = 4$, respectivamente. Em (A) e (C) o alinhamento entre os spins de α e β é ferro enquanto que em (B) e (D) é antiferro.

k_f . O valor de k_f é obtido a partir da expressão $E_f = 2t \cos(k_f a)$, que define a posição do nível de Fermi E_f . Nesta expressão a é a constante da rede e t a conexão entre os sítios das semi-cadeias que representam os contatos. Na figura 7.1 mostramos o comportamento oscilatório da interação RKKY em função de N que obtivemos através da expressão analítica $J_{RKKY}(k_f, N) \propto \pi/2 - Si(2k_f N)$ (74, 75, 76), com $k_f = \pi/2$ em consequência da escolha do nível de Fermi em $E_f = 0$. O gráfico da figura mostra a alternância ferro e anti-ferro na orientação dos spins dos PQ's interagentes. Foi possível mostrar que o acoplamento ferro ($J_{RKKY} > 0$) entre estes spins é compatível com o estabelecimento do regime Kondo e que o acoplamento anti-ferro ($J_{RKKY} < 0$) compete e pode eventualmente destruir este regime, dependendo dos valores atribuídos aos parâmetros que definem o sistema, em especial a magnitude da conexão t' com a estrutura central. Este comportamento é consistente com o obtido no estudo dos capítulos anteriores. Esta propriedade é verificada no resultado da figura 7.2, onde mostramos o comportamento do nível renormalizado $\tilde{\epsilon}_{\alpha(\beta)}$ em função do potencial de porta $Vg_{\alpha(\beta)}$ para quatro diferentes tamanhos da cadeia de

PQ's colocada entre α e β . Obtivemos neste resultado que o tradicional platô no nível de Fermi que caracteriza o estabelecimento do regime Kondo é obtido para os comprimentos associados a correlação ferro $J_{RKKY} > 0$ ((A) e (C)) e que esta estrutura não aparece para os comprimentos associados a correlação anti-ferro $J_{RKKY} < 0$ ((B) e (D)). Este comportamento mostra claramente a destruição do regime Kondo pela interação RKKY quando esta sustenta uma orientação anti-ferro entre os spins dos PQ's interagentes. Um estudo mais aprofundado da física associada a este fenômeno constitui um desdobramento natural e imediato desta tese. Outros desdobramentos possíveis são:

- O estudo dos fenômenos analisados nesta tese numa situação fora de equilíbrio termodinâmico quando o sistema está submetido a um potencial externo. Seria utilizado o formalismo de Keldysh que é de meu domínio e já foi extensamente utilizado na minha tese de mestrado para estudar o transporte eletrônico através de sistemas de PQ's fora de equilíbrio. Este estudo permitiria entender como o efeito Kondo, um fenômeno de equilíbrio, é destruído pelo potencial externo e como se conjuga este efeito com os outros apresentados nesta tese.

-Um aprofundamento da porta quântica proposta no capítulo 6 requeria um estudo dependente do tempo, para entender como os diferentes tempos envolvidos no processo de funcionamento desta porta se combinam e qual é exatamente o fator de mérito e a confiabilidade de seu funcionamento. Este estudo é claramente facilitado pelo fato do formalismo dos bósons escravos transformar um problema de muitos corpos num problema equivalente de um corpo. As grandezas auto-consistentes deveriam ser calculadas para cada instante de tempo na solução numérica da equação de Schroedinger, discretizado numericamente. O código numérico para a resolução deste problema já foi elaborado e faltaria o processamento numérico do problema.

-Nesta tese propusemos um método para o estudo da extensão da nuvem Kondo que foi aplicado a uma série de sistemas físicos constituídos por uma estrutura de PQ's. Estamos propondo a aplicação destes mesmos conceitos para o caso da interação RKKY entre dois PQ's situados a uma distância entre eles. Seria de grande interesse conceitual estudar a nuvem Kondo para outros sistemas como por exemplo: o Kondo de dois estágios, o Kondo sub e Super blindado, o Kondo com simetria $SU(4)$, etc.