

2 O modelo

Nosso interesse no transporte em um PQ baseia-se em que a existência de um estado ressonante permite construir um filtro de spin, mudando a ressonância do elétron de spin para cima ou para baixo pela intermediação de um campo magnético, ou injetando uma corrente polarizada. Num PQ é fundamental a correlação eletrônica, já que é um sistema confinado. Como consequência, o modelo deve incorporar a interação coulombiana. Incluiremos também o efeito Zeeman em nosso sistema ao aplicarmos um campo magnético externo, visto que este causa um desdobramento nos níveis de energia ocupados por elétrons com spin para cima e para baixo.

Além de estudarmos nosso sistema em função do potencial de porta que mudará a energia do estado localizado do PQ, faremos a análise com a variação de um potencial externo finito. O sistema nessas condições estará longe do equilíbrio termodinâmico. Para lidar com este problema será necessário a utilização do formalismo das funções de Green, e a situação longe do equilíbrio será tratada utilizando a formulação de Keldysh.

Iniciaremos a apresentação de nosso modelo, fazendo uma pequena introdução a alguns hamiltonianos conhecidos e importantes para nosso estudo.

2.1 O hamiltoniano de impureza de Anderson

Primeiramente, introduziremos o hamiltoniano de Hubbard²⁹, que a princípio foi proposto para o estudo de propriedades físicas dos metais de transição e das terras raras. Consideraremos, apenas hipoteticamente, uma banda parcialmente preenchida, possuindo n elétrons por átomo. Neste caso podemos escrever o hamiltoniano, como:

$$H = \sum_{ij\sigma} t_{ij} c_{i\sigma}^{\dagger} c_{j\sigma} + \sum_{ij} \sum_{\sigma\sigma'} V_{ij}^{kl} c_{i\sigma}^{\dagger} c_{j\sigma'}^{\dagger} c_{l\sigma'} c_{k\sigma}, \quad (2.1)$$

onde t_{ij} é o elemento de matriz de transferência dos primeiros vizinhos, e V_{ij}^{kl} é o elemento de matriz da interação coulombiana

$$V_{ij}^{kl} = \langle ij | V(r - r') | kl \rangle = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \times \int \frac{\phi^*(\vec{r} - \vec{r}_i)\phi(\vec{r} - \vec{r}_k)\phi^*(\vec{r}' - \vec{r}_j)\phi(\vec{r}' - \vec{r}_l)}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d^3r d^3r'. \quad (2.2)$$

Supondo que estamos descrevendo sistemas com banda estreita, podemos dizer que a integral acima, para $i = j = k = l$, é muito maior que qualquer outra integral coulombiana, permitindo que a seguinte aproximação se torne possível,

$$H = \sum_{ij\sigma} t_{ij} c_{i\sigma}^+ c_{j\sigma} + \frac{U}{2} \sum_{i\sigma} n_{i\sigma} n_{i\bar{\sigma}} + \sum_{i\sigma} \varepsilon_i n_{i\sigma}, \quad (2.3)$$

onde $n_{i\sigma} = c_{i\sigma}^+ c_{i\sigma}$. Este operador é conhecido como hamiltoniano de Hubbard. Embora simples, não existe solução exata para sistemas 3D e 2D. Para sistemas 1D, é conhecido o estado fundamental e algumas propriedades na região do nível de Fermi.

Desta forma o hamiltoniano apropriado para o estudo de uma impureza, que possui estados localizados de energia, pode ser escrito como:

$$H = \sum_i \varepsilon_i n_{i\sigma} + \sum_{ij\sigma} t_{ij} c_{i\sigma}^+ c_{j\sigma} + \frac{U}{2} \sum_{\sigma} n_{0\sigma} n_{0\bar{\sigma}} + \varepsilon_0 \sum_{\sigma} n_{0\sigma}, \quad (2.4)$$

onde os primeiros dois termos representam a energia da banda e os dois últimos a energia da impureza.

É bom salientar que na eq. 2.4 foi eliminado o somatório sobre i no termo de muitos corpos, visto que nosso problema trata apenas de uma impureza. Nesta aproximação, este hamiltoniano é chamado de hamiltoniano de Anderson³⁰.

2.2 O hamiltoniano de Rashba

Como já foi apresentado, o objetivo desta tese consiste em estudar as propriedades de transporte derivadas ao spin eletrônico do portador de carga. Este problema é de enorme interesse porque o spin, além de ser um grau de liberdade onde informação pode ser armazenada, pode ser usado para transmitir esta informação. Este spin pode ser manipulado aplicando-se um campo magnético externo, fazendo-se com que ele interaja com um outro elétron, ou modulando-se a interação spin-órbita pela mediação de um potencial externo.

Na ausência de um campo magnético, a degenerescência de spin das bandas de energia de um gás bidimensional com $k \neq 0$ é levantada pelo acoplamento do spin do elétron com seu movimento orbital. A dispersão de spin envolve um termo linear em \vec{k} , como foi primeiramente introduzido por Bychkov e Rashba^{12,28}. Esse mecanismo é popularmente conhecido como o efeito Rashba. O modelo spin-órbita (Rashba) é descrito pelo seguinte termo no hamiltoniano:

$$H_{so} = \frac{\alpha}{\hbar} \left(\vec{\sigma} \times \vec{p} \right)_z = i\alpha \left(\sigma_y \frac{\partial}{\partial x} - \sigma_x \frac{\partial}{\partial y} \right), \quad (2.5)$$

onde o eixo z é o eixo perpendicular ao gás bidimensional (que se encontra no plano $x-y$), α é a constante de acoplamento (parâmetro Rashba), que é proporcional ao campo elétrico da interface e depende do tipo da amostra. $\vec{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ são as matrizes de spin de Pauli, e \vec{p} é o operador momento.

O termo de Rashba é invariante com respeito a uma inversão temporal, ou seja, $[T, H_{so}] = 0$. O operador inversão temporal é representado por $T = i\sigma_y C$, onde C é o operador conjugação complexa. Como a degenerescência dos estados eletrônicos em $k = 0$ pode apenas ser levantada se ocorrer a quebra de simetria da inversão temporal, conclui-se que o termo de Rashba não pode produzir uma polarização espontânea de spin nos estados eletrônicos. No entanto, ele é capaz de remover a degenerescência de spin para $k \neq 0$. Isso pode ser visto de uma maneira mais clara estudando-se a forma do hamiltoniano total de um sistema composto por um gás bidimensional:

$$H = \begin{pmatrix} \frac{\hbar^2}{2m^*} (k_x^2 + k_y^2) & i\alpha k_x + \alpha k_y \\ -i\alpha k_x + \alpha k_y & \frac{\hbar^2}{2m^*} (k_x^2 + k_y^2) \end{pmatrix}, \quad (2.6)$$

onde $H = H_0 + H_{so}$, sendo H_0 a parte correspondente à energia cinética eletrônica na ausência do efeito Rashba. Como o acoplamento spin-órbita depende do campo elétrico, é possível ter o controle da quebra entre esses dois ramos, aplicando-se um campo externo que alterará o campo efetivo na interface, como já foi verificado em diversos experimentos³¹⁻³³.

Consideramos agora um sistema constituído por um gás de elétrons quase unidimensional. Ele pode ser produzido aplicando-se adequadamente um perfil de potencial em um gás bidimensional em uma heteroestrutura semicondutora, conforme mostrado na fig. (1.1). Devido ao potencial de confinamento aplicado $V(x)$, o movimento

eletrônico será quantizado na direção x . Suponhamos que o acoplamento spin-órbita seja suficientemente fraco de tal forma que H_{so} possa ser incorporado com teoria perturbativa. Neste caso o Hamiltoniano não perturbado deve satisfazer:

$$H_0 |n\sigma\rangle = E_n^0 |n\sigma\rangle, \quad (2.7)$$

sendo os auto-valores,

$$E_n^0 = E_n + \hbar^2 k_y^2 / 2m^*, \quad (2.8)$$

onde, n é o índice das sub-bandas, causadas pelo confinamento $V(x)$.

Os auto-estados degenerados são $|n\sigma\rangle \rightarrow e^{ik_y y} \phi_n(x) |\sigma\rangle$, sendo $\sigma = \uparrow, \downarrow$, onde $|\uparrow\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$, $|\downarrow\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ e $\phi_n(x)$ é solução da equação:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right) \phi_n(x) = E_n \phi_n(x). \quad (2.9)$$

Vamos agora considerar o caso $\alpha \neq 0$, usando teoria perturbativa. Em primeira ordem encontramos o seguinte sistema de equações para cada sub-banda n :

$$[E_n^0 + (H_{so})_{nn}^{\sigma\sigma} - E] a_{n\sigma}^0 + \sum_m (H_{so})_{nm}^{\sigma\bar{\sigma}} a_{m\bar{\sigma}}^0 = 0, \quad (2.10)$$

sendo $a_{n\sigma}^0$ a expansão de ordem zero do coeficiente $a_{n\sigma}$ usado para expandir os estados perturbados em termos dos estados não perturbados já conhecidos $|n\sigma\rangle$. Para o resultado da eq. 2.10 ser válido, a seguinte condição deve ser satisfeita:

$$\left| \frac{(H_{so})_{nm}^{\sigma\sigma'}}{(E_m^0 - E_n^0)} \right| \ll 1, \quad (2.11)$$

onde $(H_{so})_{nm}^{\sigma\sigma'} = \langle n\sigma | H_{so} | m\sigma' \rangle$ são os elementos de matriz que misturam as diferentes sub-bandas e os estados de spin no sistema perturbado. Explicitamente eles são:

$$(H_{so})_{nm}^{\uparrow\downarrow} = \alpha k_y \delta_{nm} + \alpha \left\langle n \left| \frac{d}{dx} \right| m \right\rangle, \quad (2.12)$$

$$(H_{so})_{nm}^{\downarrow\uparrow} = \alpha k_y \delta_{nm} - \alpha \left\langle n \left| \frac{d}{dx} \right| m \right\rangle, \quad (2.13)$$

$$(H_{so})_{nm}^{\uparrow\uparrow} = (H_{so})_{nm}^{\downarrow\downarrow} = 0. \quad (2.14)$$

Claramente a perturbação é não diagonal em relação ao spin e linear em k_y . Supondo que o potencial $V(x)$ tenha simetria de reflexão em x , estas equações podem ser reduzidas a:

$$(H_{so})_{nn}^{\uparrow\downarrow} = (H_{so})_{nn}^{\downarrow\uparrow} = \alpha k_y. \quad (2.15)$$

$$[E_n^0 - E] a_{n\sigma}^0 + (H_{so})_{nn}^{\sigma\bar{\sigma}} a_{n\bar{\sigma}}^0 = 0 \quad (2.16)$$

Inserindo este resultado na eq. 2.10, temos para cada canal n ,

$$\begin{pmatrix} E_n^0 - E & \alpha k_y \\ \alpha k_y & E_n^0 - E \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_{n\uparrow}^0 \\ a_{n\downarrow}^0 \end{pmatrix} = 0, \quad (2.17)$$

que resulta nos seguintes auto-valores

$$E^\pm(k_y) = E_n + \frac{\hbar^2}{2m^*} k_y^2 \pm \alpha k_y. \quad (2.18)$$

A natureza deste desdobramento é tal que permite elétrons com a mesma energia, terem vetores de onda diferentes, ou seja, $E^+(k_{y1}) = E^-(k_{y2})$.

Reformularemos a seguir o Hamiltoniano de Rashba na representação de interações fortes, e iremos supor um fio quase unidimensional e infinito na direção de propagação. Supomos apenas interações entre primeiros vizinhos (aproximação “tight binding”) para o cálculo perturbativo. Na representação de interações fortes, a eq. 2.5 fica:

$$H_{so}^{tb} = -t_{so} \sum_{\sigma, \sigma'} \sum_{l, m} (c_{l+1, m, \sigma'}^\dagger (i\sigma_y)_{\sigma\sigma'} c_{l, m, \sigma} - c_{l, m+1, \sigma'}^\dagger (i\sigma_x)_{\sigma\sigma'} c_{l, m, \sigma}) + hc, \quad (2.19)$$

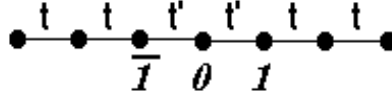


Figura 2.1: Modelo de sítios

sendo t_{so} a integral de transferência que determina a intensidade da interação spin-órbita, $c_{l,m,\sigma}^+$ o operador de criação do elétron no sítio (l, m) com spin σ ; σ_x e σ_y as respectivas matrizes de Pauli e onde hc indica o hermitiano conjugado. A integral de transferência, t_{so} , pode ser controlada através de um campo elétrico externo.

Um PQ pode ser imaginado como uma impureza, já que nele o confinamento quântico é grande, logo sua interação coulombiana também será. Isso justifica usarmos o hamiltoniano de Anderson para estudar um ponto quântico ligado eletricamente a dois contatos, como mostrado na fig. (2.1).

Temos duas cadeias lineares semi-infinitas, à esquerda (findando em $\bar{1}$) e à direita (iniciando em 1). O PQ liga-se a essas duas cadeias através do termo de hopping t' . O sistema será representado pelo hamiltoniano de impureza de Anderson, somado à interação spin-órbita de maneira a descrever o efeito Rashba. Escrevendo este hamiltoniano na representação de interações fortes, temos:

$$H_A = \sum_{\sigma,i,j} t_{ij} c_{i\sigma}^+ c_{j\sigma} + \sum_{\sigma,i \neq 0} \varepsilon_i^\sigma n_{i\sigma} + t' (c_{0\sigma}^+ c_{1\sigma} + c_{0\sigma}^+ c_{\bar{1}\sigma}) + H_0 + H_{so} + hc, \quad (2.20)$$

$$H_0 = (\varepsilon_0^\sigma + eV_g) \sum_{\sigma} n_{0\sigma} + U n_{0\uparrow} n_{0\downarrow}, \quad (2.21)$$

$$H_{so} = - \sum_{\sigma\sigma'ij} t_{ij}^{so} c_{i\sigma}^+ (i\sigma_y)_{\sigma\sigma'} c_{j\sigma'} + hc.$$

Na eq. 2.20 os primeiros dois termos representam a cadeia excetuando o PQ, localizado no sítio 0, o terceiro termo os contatos com o PQ caracterizado pelo hamiltoniano H_0 , com um estado local de energia $\varepsilon_0 + eV_g$, onde V_g representa o potencial

de porta variável e U é a correlação eletrônica local no PQ. O último termo, H_{so} , é o termo de Rashba expresso em segunda quantização.

2.3 As funções de Green

O método de funções de Green para a resolução de equações de movimento tem uma variedade enorme de aplicações em Física, e pode ser desenvolvido em diferentes graus de complexidade, de acordo com as necessidades específicas de cada uma de suas formas de utilização. Iremos fazer uma pequena introdução de função de Green visando especificamente a resolução de nosso problema.

Consideramos inicialmente um problema independente do tempo, onde uma partícula está sujeita a interações com o meio externo, as quais podem ser escrita sob a forma de um potencial. O hamiltoniano é escrito em termos das coordenadas da partícula:

$$H_0 = H_0(\vec{r}) = \frac{p^2}{2m} + V(\vec{r}). \quad (2.22)$$

A equação de Schrödinger dependente do tempo é:

$$\left\{ \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t} + H_0(\vec{r}) \right\} \Psi_0(\vec{r}, t) = 0. \quad (2.23)$$

A função de Green para o problema é definida pela equação:

$$\left\{ \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t} + H_0(\vec{r}) \right\} G_0(\vec{r}, t; \vec{r}', t') = -\hbar \delta(\vec{r} - \vec{r}') \delta(t - t'). \quad (2.24)$$

O significado da função de Green se torna claro introduzindo um outro potencial $V_1(r, t)$, além dos já incluídos em H_0 ; neste caso, a equação de Schrödinger se escreve como:

$$\left\{ \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t} + H_0(\vec{r}) \right\} \Psi(\vec{r}, t) = -V_1(\vec{r}, t) \Psi(\vec{r}, t), \quad (2.25)$$

que tem como solução formal ,

$$\Psi(\vec{r}, t) = \Psi_0(\vec{r}, t) + \frac{1}{\hbar} \int \int G_0(\vec{r}, t; \vec{r}', t') V_1(\vec{r}', t') \Psi(\vec{r}', t') d^3 \vec{r}' d^3 t'. \quad (2.26)$$

É neste momento que a função de Green é vista como um propagador, trazendo para o ponto \vec{r} , no instante t informações sobre \vec{r}' no instante t' . Assim sendo, a função de Green deve satisfazer a condição de causalidade. Isto significa que, para a construção de $G_0(\vec{r}, t)$, só devem importar os valores passados $G_0(\vec{r}', t')$ ($t' < t$), e não os valores futuros. Da eq. 2.26, temos:

$$G_0(\vec{r}, t; \vec{r}', t') = 0, \text{ para } t' > t. \quad (2.27)$$

A função de Green que satisfaz esta condição é chamada de Green retardada e é denominada por:

$$G_0 = G_0^+(\vec{r}, t; \vec{r}', t'). \quad (2.28)$$

Podemos introduzir uma representação de energia, através de uma transformada de Fourier,

$$G_0^+(\vec{r}, t; \vec{r}', t') = \int_{-\infty}^{\infty} G_0(\vec{r}, \vec{r}', E) e^{-iE(t-t')/\hbar} dE \quad (2.29)$$

Substituindo a eq. 2.29 na eq. 2.24, verifica-se que $G_0^+(\vec{r}, \vec{r}', E)$ deve obedecer à seguinte equação:

$$(H_0 - E) G_0^+(\vec{r}, \vec{r}', E) = -\delta(\vec{r} - \vec{r}') \quad (2.30)$$

Para fazermos uma representação matricial da função de Green, vamos supor que E_m e Ψ_m sejam respectivamente os auto-estados e auto-valores de H_0 .

$$H_0 \Psi_m(\vec{r}) = E_m \Psi_m(\vec{r}). \quad (2.31)$$

Representando a função de Green nesta base, isto é,

$$G_0(E) = \sum_{m,n} G_{0mn}(E) \Psi_m(\vec{r}) \Psi_n^*(\vec{r}), \quad (2.32)$$

obtém-se, a partir da definição de $G(E)$

$$(H_0 - E) G_0(E) = -\delta(\vec{r} - \vec{r}'),$$

$$(H_0 - E) G_0(E) = \sum_{m,n} (E_m - E) G_{0mn}(E) \Psi_m(\vec{r}) \Psi_n^*(\vec{r}'). \quad (2.33)$$

Da relação de completeza,

$$\sum_m \Psi_m(\vec{r}) \Psi_m^*(\vec{r}') = \delta(\vec{r} - \vec{r}'), \quad (2.34)$$

vem a solução para os elementos de matriz da função de Green:

$$G_{0mn}(E) = \frac{\delta_{mn}}{E - E_m}. \quad (2.35)$$

Então,

$$G_0(E) = \sum_m \frac{\Psi_m(\vec{r}) \Psi_m^*(\vec{r}')}{E - E_m}, \quad (2.36)$$

ou, na notação de Dirac,

$$G_0(E) = \sum_m |m\rangle \frac{1}{E - E_m} \langle m|. \quad (2.37)$$

Neste sentido, pode-se escrever $G_0(E)$ sob a seguinte forma de um operador greeniano:

$$\hat{G}_0(E) = \frac{1}{E - H_0}. \quad (2.38)$$

É comum subtrair uma pequena parte imaginária aos autovalores de H_0 , de modo que os pólos de $G_0(E)$ fiquem abaixo do eixo real das energias, garantindo causalidade. Finalmente, os elementos de matriz diagonais de $G_0(E)$ se escrevem, como:



Figura 2.2: Modelo de sítios constituído por duas semicadeias representando o contato e o PQ.

$$G_{0mm}(E) = \lim_{\delta \rightarrow 0} \frac{1}{E - E_m + i\delta} . \quad (2.39)$$

Tomemos como H_0 o hamiltoniano dos sítios isolados com autofunções localizadas $|i\rangle$ e autovalores ε_i . Suponhamos que queremos resolver o hamiltoniano $H = H_0 + V$, em que conhecemos as autofunções de H_0 , Ψ_0 , e escrevemos:

$$\Psi = \Psi_0 + \Psi_p , \quad (2.40)$$

onde

$$\Psi_p = G_0 V \Psi . \quad (2.41)$$

O operador de Green relativo ao hamiltoniano será:

$$\hat{G}(E) = \frac{1}{E - (H_0 + V)} = \hat{G}_0 + \hat{G}_0 V \hat{G} . \quad (2.42)$$

2.4 Aplicação da função de Green ao modelo adotado.

O modelo por nós adotado na primeira parte desta tese consiste em duas semicadeias representando os contatos ligadas a um PQ, como pode ser visualizado na figs. (2.2).

Apenas com o intuito de simplificar a notação, chamaremos G_0 que representa a função de Green de um sítio isolado na eq. 2.42 de g e chamaremos o potencial entre os sítios de t ao invés de V , fazendo isso temos:

$$\mathbf{G} = \mathbf{g} + \mathbf{g}t\mathbf{G} , \quad (2.43)$$

$$G_{ij}^{\sigma\sigma'} = g_i^\sigma \delta_{ij} \delta_{\sigma\sigma'} + g_i^\sigma \sum_{k\sigma''} t_{ik}^{\sigma\sigma''} G_{kj}^{\sigma''\sigma'} . \quad (2.44)$$

sendo,

$$g_i^\sigma(E) = \frac{1 - n_{\bar{\sigma}}}{E - (\varepsilon_i^\sigma - \sigma g_L \mu B) - V_g} + \frac{n_{\bar{\sigma}}}{E - (\varepsilon_i^\sigma - \sigma g_L \mu B) - V_g - U} , \quad (2.45)$$

onde g_L é o fator de Landé (para o caso do desdobramento de energia causada pelo efeito Zeeman), B o campo magnético, U a interação coulombiana e V_g o potencial de porta.

O campo elétrico externo, responsável pela corrente e o campo magnético externo, são simulados adotando-se elementos de matriz diagonais ε_i^σ dependente do sítio e do spin.

Consideramos apenas interações de primeiros vizinhos, ou seja:

$$t_{ik}^{\sigma\sigma'} = \begin{cases} t^{\sigma\sigma'} & \text{se } k = i \pm 1 \\ 0 & \text{se } k \neq i \pm 1 \end{cases} \quad (2.46)$$

sendo que o modelo adotado não possui apenas um canal, são dois canais por onde circulam spin para cima e para baixo respectivamente. Logo todas estas equações devem ser expressas na forma matricial. Ou seja,

$$\hat{G} = \begin{pmatrix} G^{\uparrow\uparrow} & G^{\uparrow\downarrow} \\ G^{\downarrow\uparrow} & G^{\downarrow\downarrow} \end{pmatrix} , \quad \hat{g} = \begin{pmatrix} g^{\uparrow\uparrow} & g^{\uparrow\downarrow} \\ g^{\downarrow\uparrow} & g^{\downarrow\downarrow} \end{pmatrix} \text{ e} \quad (2.47)$$

$$\hat{t} = \begin{pmatrix} t & t_{so} \\ t_{so} & t \end{pmatrix} . \quad (2.48)$$

Note que \hat{t} além de ligar um sítio com seu primeiro vizinho via t , também permite a troca de canais via de t_{so} . A eq. 2.44 é expressa na forma matricial como:

$$\hat{G}_{ij} = \hat{g}_i \delta_{ij} + \hat{g}_i \sum_k \hat{t}_{ik} \hat{G}_{kj}, \quad (2.49)$$

Usando a técnica detalhada no apêndice A, ligamos a semicadeia do lado esquerdo até o sítio anterior ao PQ ao qual chamaremos aqui de sítio 1. De maneira análoga, vestimos a semicadeia da direita até o PQ ao qual chamaremos de sítio 2. Fazendo isso, temos duas funções de Green vestidas representando toda a cadeia. O próximo passo é ligar esses dois sítios da seguinte forma:

$$\begin{cases} \hat{G}_{22} = \hat{g}_2 + \hat{g}_2 \hat{t} \hat{G}_{12} \\ \hat{G}_{12} = \hat{g}_1 \hat{t} \hat{G}_{22} \end{cases} \implies \hat{G}_{22} = \left(\hat{I} - \hat{g}_2 \hat{t} \hat{g}_1 \hat{t} \right)^{-1} \hat{g}_2, \quad (2.50)$$

$$\begin{cases} \hat{G}_{11} = \hat{g}_1 + \hat{g}_1 \hat{t} \hat{G}_{21} \\ \hat{G}_{21} = \hat{g}_2 \hat{t} \hat{G}_{11} \end{cases} \implies \hat{G}_{11} = \left(\hat{I} - \hat{g}_1 \hat{t} \hat{g}_2 \hat{t} \right)^{-1} \hat{g}_1, \quad (2.51)$$

onde \hat{g}_1 é a matriz da função de Green vestida que engloba a todo o sistema do lado esquerdo do PQ, \hat{g}_2 a matriz da função de Green vestida representando o lado direito, incluindo o próprio PQ e a semicadeia do lado direito e \hat{I} é a matriz identidade.

Trataremos também de sistemas longe do equilíbrio (vide apêndice C) e para tal é conveniente introduzirmos algumas propriedades do formalismo de Keldysh. Precisamos neste momento relacionar as funções de Green vistas até aqui com funções de Green longe do equilíbrio. Para tal, introduzimos a seguinte propriedade:

$$\hat{G}_{ij} = \hat{G}_{ij}^r \quad \text{e} \quad \hat{G}_{ij}^* = \hat{G}_{ij}^a, \quad (2.52)$$

que podem ser relacionados com G^{+-} e G^{-+} , conforme apêndice B.

Para o cálculo autoconsistente da carga, usamos:

$$\begin{aligned} n_\sigma &= \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{+\infty} G_{22}^{+-}(E) dE \\ &= \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{+\infty} [(1 + G^r \Sigma^r) g^{+-} (1 + G^a \Sigma^a)]_{22} dE \end{aligned} \quad (2.53)$$

Como n_σ depende de $n_{\bar{\sigma}}$, conforme eq. 2.45, atribuímos um valor inicial para $n_{\bar{\sigma}}$ e obtemos n_σ . Esse processo é iterado até ocorrer convergência para n_σ e $n_{\bar{\sigma}}$.



Figura 2.3: Modelo de sítios para o cálculo da corrente.

2.5 A corrente elétrica e o formalismo de Keldysh

A corrente desse sistema longe do equilíbrio é obtida usando-se o formalismo de Keldysh⁸, através do uso de funções de Green, considerando efeitos de correlação localizados dentro do contexto da aproximação de Hubbard I³⁴. Como mostrado a seguir, a corrente por spin σ pode ser escrita como:

$$I_{\sigma} = \frac{e}{\hbar} t_{12}^{\sigma} \int_{-\infty}^{+\infty} dE (G_{12}^{+-}(E) - G_{21}^{-+}(E))_{\sigma}, \quad (2.54)$$

onde $G_{12}^{-+}(E)$ corresponde à função de Keldysh longe do equilíbrio que nos fornece a probabilidade de um elétron com energia E saltar de um sítio 1 para um sítio 2 quando o sistema é conectado a dois reservatórios com energias de Fermi ε_{fd} e ε_{fe} de tal forma a criar uma diferença de potencial $\Delta V = \varepsilon_{fd} - \varepsilon_{fe}$. Os cálculos realizados para obter a corrente podem ser visto em maiores detalhes no Apêndice B.

Para chegarmos à eq. 2.54, iniciamos com um hamiltoniano em uma base localizada:

$$H = \sum_{ij} \sum_{\sigma\sigma'} t_{ij}^{\sigma\sigma'} c_{i\sigma}^{\dagger} c_{j\sigma'}. \quad (2.55)$$

Supondo um caso unidimensional, em uma situação estacionária, a corrente deve ser a mesma em qualquer ponto do sistema, logo podemos escolher qualquer ponto para calculá-la.

Consultando o apêndice B, podemos expressar o operador corrente (considerando o spin) da seguinte forma:

$$I_{j\sigma} = -i \frac{et_{j-1,j}^{\sigma}}{\hbar} [c_{j\sigma}^{\dagger} c_{j-1\sigma} - c_{j\sigma} c_{j-1\sigma}^{\dagger}]. \quad (2.56)$$

Em uma situação estacionária, a média $\langle I_j \rangle$ não depende do sítio particular j . Portanto,

$$I_\sigma = \langle I_{j\sigma} \rangle = -i \frac{et_{j-1,j}}{\hbar} [\langle c_{j\sigma}^+ c_{j-1\sigma} \rangle - \langle c_{j\sigma} c_{j-1\sigma}^+ \rangle]. \quad (2.57)$$

Para avaliarmos os elementos $\langle c_j^+ c_{j-1} \rangle$ será necessário implantar métodos perturbativos válidos para situações longe do equilíbrio. Usando o formalismo Keldysh, temos:

$$i \langle c_{j\sigma}^+ c_{j-1\sigma} \rangle \equiv G_{j\sigma, j-1\sigma}^{+-}(t, t) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dE}{2\pi} G_{j\sigma, j-1\sigma}^{+-}(E). \quad (2.58)$$

Logo, podemos escrever o operador corrente como:

$$I_\sigma = \frac{et_{j-1,j}}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dE [G_{j-1\sigma, j\sigma}^{+-}(E) - G_{j\sigma, j-1\sigma}^{-+}(E)]. \quad (2.59)$$

Supondo que $j-1=1$ seja o sítio anterior ao PQ e $j=2$ seja o sítio do PQ, temos:

$$I_\sigma = \frac{e}{\hbar} t_{12} \int_{-\infty}^{+\infty} dE (G_{12\sigma\sigma}^{+-}(E) - G_{21\sigma\sigma}^{-+}(E)), \quad (2.60)$$

que é a eq. 2.54, que desejávamos obter. Podemos ainda escrever a corrente de modo alternativo, usando a relação matricial e suprimindo o spin para não sobrecarregar a notação,

$$\mathbf{G}_{ij}^{-+} = \mathbf{g}_{ij}^{-+} + (\mathbf{g}^{-+} \Sigma^a \mathbf{G}^a)_{ij} + (\mathbf{g}^r \Sigma^r \mathbf{G}^{-+})_{ij} - (\mathbf{g}^r \Sigma^{-+} \mathbf{G}^a)_{ij}. \quad (2.61)$$

Em termos dos elementos de matriz:

$$\hat{G}_{12}^{-+} = \hat{g}_1^{-+} \hat{t}_{12} \hat{G}_{22}^a + \hat{g}_1^r \hat{t}_{12} \hat{G}_{22}^{-+}. \quad (2.62)$$

Por outro lado,

$$\mathbf{G}_{ij}^{-+} = \mathbf{g}_{ij}^{-+} + (\mathbf{G}^{-+} \Sigma^a \mathbf{g}^a)_{ij} + (\mathbf{G}^r \Sigma^r \mathbf{g}^{-+})_{ij} - (\mathbf{G}^r \Sigma^{-+} \mathbf{g}^r)_{ij}, \quad (2.63)$$

o que leva a

$$\hat{G}_{21}^{-+} = \hat{G}_{22}^{-+} \hat{t}_{21} \hat{g}_1^a + \hat{G}_{22}^r \hat{t}_{21} \hat{g}_1^{-+}. \quad (2.64)$$

Adotando como 1 e 2 sítios que estejam em uma região onde a interação spin-órbita é nula e a integral de transferência entre estes seja unitária, podemos afirmar que $\hat{\mathbf{t}}_{12} = \hat{\mathbf{t}}_{21} = t\hat{\mathbf{I}}$. Subtraindo-se a eq. 2.62 da eq. 2.64, temos:

$$\hat{G}_{12}^{-+}(E) - \hat{G}_{21}^{-+}(E) = \left(\hat{G}_{22}^{-+} \hat{g}_1^{+-} - \hat{g}_1^{-+} \hat{G}_{22}^{+-} \right) t, \quad (2.65)$$

obtendo com isso, a forma mais sintética da corrente:

$$I_\sigma = \frac{2e}{\hbar} t^2 \int_{-\infty}^{+\infty} dE (g_{1\sigma}^{-+} G_{22\sigma}^{+-} - G_{22\sigma}^{-+} g_{1\sigma}^{+-}). \quad (2.66)$$

Levando-se em conta que, em lugar do vácuo, temos o sistema captando elétrons de um emissor cujo nível de Fermi é ε_{fe} , e um coletor cujo nível de Fermi é ε_{fd} , apenas as frequências nesse intervalo irão contribuir para a corrente, assim:

$$I_\sigma = \frac{2e}{\hbar} t^2 \int_{\varepsilon_{fd}}^{\varepsilon_{fe}} dE (g_{1\sigma}^{-+} G_{22\sigma}^{+-} - G_{22\sigma}^{-+} g_{1\sigma}^{+-}) \quad (2.67)$$

O integrando é

$$g_{1\sigma}^{-+} G_{22\sigma}^{+-} - G_{22\sigma}^{-+} g_{1\sigma}^{+-} \quad (2.68)$$

Analisemos o segundo termo, usando C.35

$$-G_{22\sigma}^{-+} g_{1\sigma}^{+-} = - \left[(1 + G^r \Sigma^r) g^{-+} (1 + G^a \Sigma^a) \right]_{22} g_{1\sigma}^{+-} \quad (2.69)$$

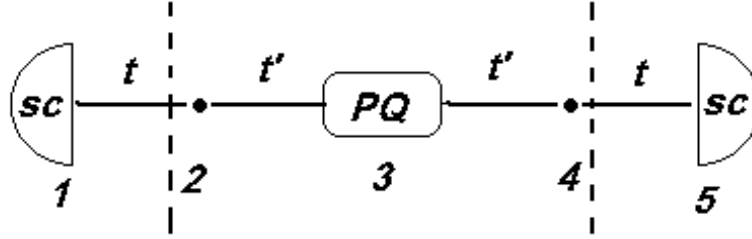


Figura 2.4: Representação da cadeia com apenas cinco sítios

Por outro lado, em termos da distribuição de Fermi Dirac no sítio j , $f_j(w)$, e a respectiva densidade de estados $\rho_j(w)$, as funções de Green não perturbadas são:

$$g_{j\sigma}^{+-}(w) = if_j(w)\rho_j(w) \quad (2.70)$$

$$g_{j\sigma}^{-+}(w) = i(1 - f_j(w))\rho_j(w)$$

Para calcular 2.69 supomos que o sistema do meio da fig. (2.4), estando desconectado (ver fig. (2.5)), está completamente cheio de elétrons. Portanto os $g_{j\sigma}^{-+}(w)$ são nulos para $j = 2, 3, 4$; pois $f_j(w) \equiv 1$.

Como $f_j(1 - f_j) \equiv 0$ a $T = 0$, temos que $g_{1\sigma}^{-+}g_{1\sigma}^{+-} = 0$. Em resumo, só contribuem os termos que contém $g_{5\sigma}^{-+}$. Finalmente, como os termos de 2.69 devem começar e acabar com $j = 2$, será

$$-G_{22\sigma}^{-+}g_{1\sigma}^{+-} = -[G^r\Sigma^r g_{5\sigma}^{-+}G^a\Sigma^a]_{22}g_{1\sigma}^{+-} = -G_{24\sigma}^r t_{45}g_{5\sigma}^{-+}t_{54}G_{42\sigma}^a g_{1\sigma}^{+-}. \quad (2.71)$$

Considerando que:

$$t_{45} = t_{54} = t \quad , \quad G_{42\sigma}^a = G_{24\sigma}^{r*},$$

a equação 2.71 será:

$$-G_{22\sigma}^{-+}g_{1\sigma}^{+-} = -|G_{24\sigma}^r|^2 t^2 g_{5\sigma}^{-+}g_{1\sigma}^{+-} = |G_{24\sigma}^r|^2 t^2 \rho_{sc_L}(w)\rho_{sc_R}(w)f_L(w)(1 - f_R(w)) \quad (2.72)$$

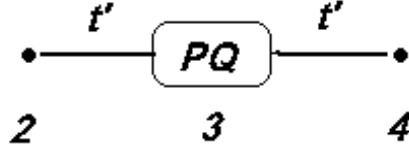


Figura 2.5: Modelo da cadeia adotado para o cálculo de $G_{24\sigma}$.

O fator $|G_{24\sigma}^r|^2 t^2$ fornece a transmitância do sistema que liga as duas semicadeias. O fator $\rho_{sc_L}(w) f_L(w)$ é a densidade espectral da semicadeia à esquerda. Isto é, a densidade de estados ocupados à esquerda. Finalmente o fator $\rho_{sc_R}(w) (1 - f_R(w))$ é a densidade de estados desocupados à direita. O produto destas é a corrente que circula da esquerda para a direita.

O outro somando em (2.68) irá conter, por simetria, o fator:

$$g_{5\sigma}^{+-} g_{1\sigma}^{+-} = -\rho_{sc_R}(w) \rho_{sc_L}(w) (1 - f_L(w)) f_R(w) \quad (2.73)$$

O produto $(1 - f_L(w)) f_R(w)$ é nulo para $\varepsilon_{F_L} > \varepsilon_{F_R}$ a $T = 0$. Este somando, que será a corrente que circula da direita para a esquerda só contribui para $T \neq 0$.

Da eq. 2.44 obtemos, para as funções de Green retardadas,

$$G_{24\sigma}^r = \tilde{g}_{2\sigma} V_{23} G_{34\sigma}^r = \tilde{g}_{2\sigma} t' G_{34\sigma}^r, \quad (2.74)$$

$$G_{34\sigma}^r = g_{3\sigma} (V_{32} G_{24\sigma}^r + V_{34} G_{44\sigma}^r) = g_{3\sigma} t' (G_{24\sigma}^r + G_{44\sigma}^r) \quad (2.75)$$

e

$$G_{44\sigma}^r = \tilde{g}_{4\sigma} + \tilde{g}_{4\sigma} V_{43} G_{34\sigma}^r \quad (2.76)$$

logo,

$$G_{34\sigma}^r = g_{3\sigma} t' [\tilde{g}_2 t' G_{34\sigma} + \tilde{g}_{4\sigma} + \tilde{g}_{4\sigma} t' G_{34\sigma}^r] \quad (2.77)$$

isto é,

$$G_{34\sigma} \left[1 + g_{3\sigma} t'^2 (\tilde{g}_2 + \tilde{g}_4) \right] = g_{3\sigma} t' \tilde{g}_{4\sigma} \quad (2.78)$$

de onde obtemos:

$$G_{34\sigma} = \frac{g_{3\sigma} t' \tilde{g}_{4\sigma}}{[1 + g_{3\sigma} t'^2 (\tilde{g}_2 + \tilde{g}_4)]}. \quad (2.79)$$

Finalmente

$$G_{24\sigma}^r = \frac{\tilde{g}_{2\sigma} t' g_{3\sigma} t' \tilde{g}_{4\sigma}}{[1 + g_{3\sigma} t'^2 (\tilde{g}_2 + \tilde{g}_4)]}, \quad (2.80)$$

isto é,

$$G_{24\sigma}^r = \frac{\tilde{g}_{sc_L\sigma} t' g_{d\sigma} t' \tilde{g}_{sc_R\sigma}}{[1 + g_{d\sigma} t'^2 (\tilde{g}_{sc_L\sigma} + \tilde{g}_{sc_R\sigma})]}, \quad (2.81)$$

onde $g_{d\sigma} = g_{3\sigma}$ é a função de Green despida do PQ, $\tilde{g}_{2\sigma} = \tilde{g}_{sc_L\sigma}$ é a função de Green da semicadeia do lado esquerdo e $\tilde{g}_{4\sigma} = \tilde{g}_{sc_R\sigma}$ é a função de Green da semicadeia do lado direito.