

## A Semicadeia e cadeia infinita.

Apenas para ilustrar a técnica por nós usada para vestir um determinado sítio, mostramos a seguir como é possível vestir uma semicadeia com um sítio. Para tal, usaremos a seguinte notação:  $g_{sc}$  será a função de Green de uma semicadeia infinita para o lado esquerdo, e  $g_2$  a função de Green do sítio isolado, ao qual queremos vestir na semicadeia. Podemos apresentar este modelo conforme a fig. (A.1). Assim,

$$\begin{cases} G_{11} = g_1 + g_1 t G_{21} \\ G_{21} = g_2 t G_{11} \end{cases} \implies G_{11} = \frac{g_1}{1 - g_1 t^2 g_2} = \frac{g_{sc}}{1 - g_{sc} t^2 g_2}, \quad (\text{A.1})$$

onde  $t$  é o potencial entre a semicadeia e o sítio. Por outro lado,

$$\begin{cases} G_{22} = g_2 + g_2 t G_{12} \\ G_{12} = g_1 t G_{22} \end{cases} \implies G_{22} = \frac{g_2}{1 - g_2 t g_1 t} = \frac{g_2}{1 - g_2 t^2 g_{sc}}, \quad (\text{A.2})$$

mas, é claro que ao vestir uma semicadeia composta por infinitos sítios com mais um sítio, teremos como resultado a própria semicadeia. Logo podemos afirmar que  $G_{22} = g_{sc}$ . Portanto,

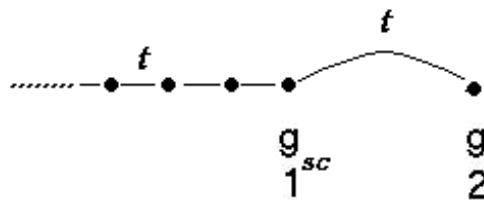


Figura A.1: Modelo de sítios ligando um sítio isolado a uma semicadeia.

$$G_{22} = \frac{g}{1 - gt^2 g_{sc}} = g_{sc} \quad (\text{A.3})$$

onde usamos  $g_2 = g$  para simplificar a notação. Deste modo,

$$-g = -g_{sc} + gt^2 g_{sc}, \quad g_{sc}^2 - \frac{1}{gt^2} g_{sc} + \frac{1}{t^2} = 0, \quad (\text{A.4})$$

$$g_{sc} = \frac{1}{2gt^2} \pm \sqrt{\frac{1}{4g^2 t^4} - \frac{1}{t^2}} = \frac{1}{2gt^2} \left[ 1 \pm i \sqrt{-1 + 4g^2 t^2} \right] \quad (\text{A.5})$$

que é a função de Green da semicadeia.

A densidade de estados ( $D_{sc}$ ) é:

$$D_{sc} = -\frac{1}{\pi} \text{Im}(g_{sc}) \quad (\text{A.6})$$

Logo, só vai existir densidade de estados quando,

$$4g^2 t^2 - 1 > 0. \quad (\text{A.7})$$

Mas a função de Green do sítio isolado é  $g = \frac{1}{E - \varepsilon_0}$ . Desta forma:

$$\left( \frac{E - \varepsilon_0}{2t} \right)^2 < 1 \quad -2t \leq E - \varepsilon_0 \leq 2t. \quad (\text{A.8})$$

Portanto a densidade de estados de uma semicadeia é:

$$D_{sc}(E) = \frac{1}{\pi t} \sqrt{1 - \left( \frac{E - \varepsilon_0}{2t} \right)^2} \quad (\text{A.9})$$

De maneira análoga, podemos calcular a densidade de estados de uma cadeia infinita ligando duas semicadeias conforme é mostrado no modelo da fig. (A.3).

Após alguma álgebra, é simples mostrar que a densidade de estados de uma cadeia infinita é:

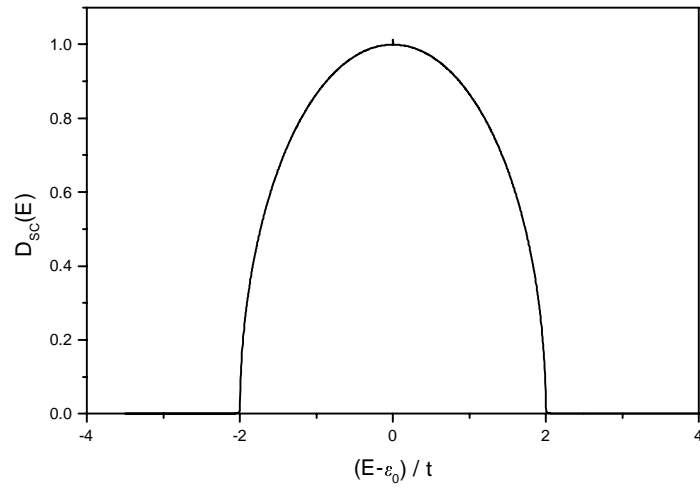


Figura A.2: Densidade de estados de uma semicadeia.

$$G_c = \frac{g_{sc}}{1 - g_{sc}t^2} = \frac{1}{\sqrt{(E - \varepsilon_0)^2 - 4t^2}}. \quad (\text{A.10})$$

logo,

$$D_c = \frac{1}{2\pi t} \frac{1}{\sqrt{1 - \left(\frac{E - \varepsilon_0}{2t}\right)^2}}. \quad (\text{A.11})$$

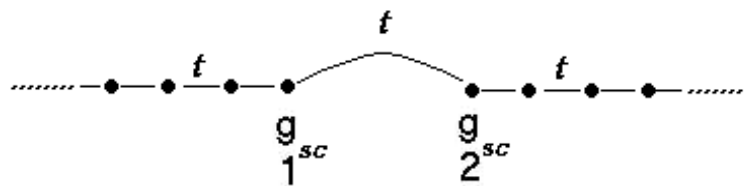


Figura A.3: Modelo de sítios ligando duas semicadeias.

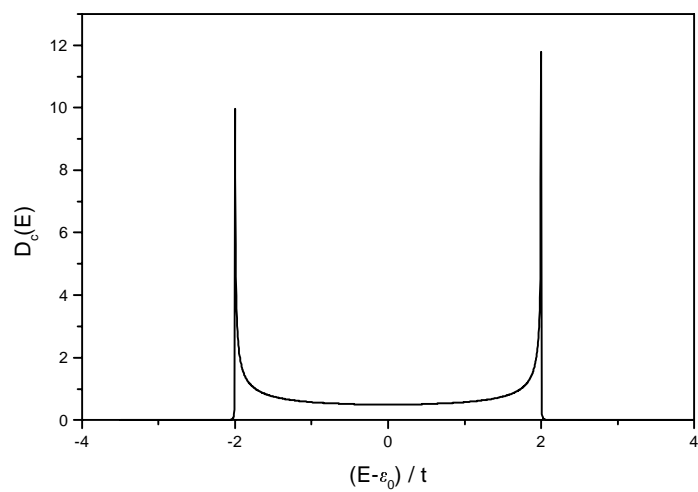


Figura A.4: Densidade de estados de uma cadeia infinita.

## B A corrente

O operador densidade de carga é dado por:

$$\hat{q}_{j\sigma} = e\hat{n}_{j\sigma} = ec_{j\sigma}^+c_{j\sigma}. \quad (\text{B.1})$$

Assim, sua equação de movimento é:

$$\frac{d\hat{q}_{j\sigma}}{dt} = e \left[ \left( \frac{dc_{j\sigma}^+}{dt} \right) c_{j\sigma} + \left( \frac{dc_{j\sigma}}{dt} \right) c_{j\sigma}^+ \right] \quad (\text{B.2})$$

Nos sítios onde não há interação spin-órbita, o hamiltoniano pode ser expresso da seguinte forma:

$$H = \sum_{j\sigma} \varepsilon_{j\sigma} c_{j\sigma}^+ c_{j\sigma} + t \left( c_{j\sigma}^+ c_{(j-1)\sigma} + c_{(j-1)\sigma}^+ c_{j\sigma} \right). \quad (\text{B.3})$$

Mas,

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{dc_{i\sigma}^+}{dt} &= [c_{i\sigma}^+, H] \\ &= \left[ c_{i\sigma}^+, \sum_{j\sigma'} \varepsilon_{j\sigma'} c_{j\sigma'}^+ c_{j\sigma'} + t \left( c_{j\sigma'}^+ c_{(j-1)\sigma'} + c_{(j-1)\sigma'}^+ c_{j\sigma'} \right) \right] \\ &= \varepsilon_{i\sigma} c_{i\sigma}^+ + t \left( c_{(j+1)\sigma}^+ + c_{(j-1)\sigma}^+ \right). \end{aligned} \quad (\text{B.4})$$

Substituindo B.4 em B.2 obtemos:

$$\begin{aligned} \frac{d\hat{q}_{j\sigma}}{dt} &= \frac{et}{i\hbar} \left[ c_{(j+1)\sigma}^+ c_{j\sigma} + c_{(j-1)\sigma}^+ c_{j\sigma} - c_{(j+1)\sigma} c_{j\sigma}^+ - c_{(j-1)\sigma} c_{j\sigma}^+ \right] \\ &= \frac{et}{i\hbar} \left[ c_{(j-1)\sigma}^+ c_{j\sigma} - c_{(j-1)\sigma} c_{j\sigma}^+ \right] - \frac{et}{i\hbar} \left[ c_{(j+1)\sigma}^+ c_{j\sigma} - c_{(j+1)\sigma} c_{j\sigma}^+ \right] \\ &= \hat{I}_{(j-1)\sigma} - \hat{I}_{j\sigma} \end{aligned} \quad (\text{B.5})$$

Onde definimos

$$\hat{I}_{(j-1)\sigma} = \frac{et}{i\hbar} \left[ c_{(j-1)\sigma}^+ c_{j\sigma} - c_{(j-1)\sigma} c_{j\sigma}^+ \right] \quad (\text{B.6})$$

Tirando a média da eq. B.6, obtemos:

$$\langle \hat{I}_{(j-1)\sigma} \rangle = \frac{et}{i\hbar} \left[ \langle c_{(j-1)\sigma}^+ c_{j\sigma} \rangle - \langle c_{(j-1)\sigma} c_{j\sigma}^+ \rangle \right]. \quad (\text{B.7})$$

Sendo  $\hat{I}$  operador corrente e  $|\phi\rangle$  o estado de um determinado sistema, temos:

$$\langle \hat{I}_\sigma \rangle = \langle \phi | \hat{I}_{(j-1)\sigma} | \phi \rangle \quad (\text{B.8})$$

Se o sistema não for de muitos corpos, podemos expandir

$$|\phi\rangle = \sum_{l\sigma'} a_{l\sigma'} |l\sigma'\rangle, \quad (\text{B.9})$$

de forma que

$$c_{j-1\sigma} |\phi\rangle = \sum_{l\sigma'} a_{l\sigma'} c_{j-1\sigma} |l\sigma'\rangle. \quad (\text{B.10})$$

Mas,

$$c_{j-1\sigma} |l\sigma'\rangle = \delta_{l,j-1} \delta_{\sigma\sigma'} |0\rangle, \quad (\text{B.11})$$

logo,

$$c_{j-1\sigma} |\phi\rangle = a_{j-1\sigma} |0\rangle, \quad (\text{B.12})$$

e

$$\langle \phi | = \sum_{i\sigma'} a_{i\sigma'}^* \langle i\sigma' |. \quad (\text{B.13})$$

$$\langle \phi | c_{j\sigma}^+ = \sum_{i\sigma'} a_{i\sigma'}^* \langle i\sigma' | c_{j\sigma}^+ \quad (\text{B.14})$$

$$\langle i\sigma' | c_{j\sigma}^+ = (c_{j\sigma} | i\sigma')^+ = \delta_{ij} \delta_{\sigma\sigma'} \langle 0 |. \quad (\text{B.15})$$

Portanto

$$\langle \phi | c_{j\sigma}^+ = a_{j\sigma}^* \langle 0 |. \quad (\text{B.16})$$

Logo,

$$\langle \phi | c_{j\sigma}^+ c_{j-1\sigma} | \phi \rangle = a_{j\sigma}^* a_{j-1\sigma}. \quad (\text{B.17})$$

Somando sobre todos os estados, teremos para a densidade de carga:

$$q_{j\sigma} = e \int_0^{k_f} |a_{j\sigma}^k|^2 dk \quad (\text{B.18})$$

A derivada temporal da densidade de probabilidade nos permite encontrar a equação de continuidade dada por B.5:

$$\frac{dq_{j\sigma}}{dt} = I_{j\sigma} - I_{j-1\sigma} \quad (\text{B.19})$$

onde a corrente vem dada por

$$\begin{aligned} I_{j\sigma} &= \frac{eit}{\hbar} \int_0^{k_f} (a_{j,\sigma}^{k*} a_{j+1,\sigma}^k - a_{j,\sigma}^k a_{j+1,\sigma}^{k*}) dk \\ &= \frac{2et}{\hbar} \int_0^{k_f} \text{Im} (a_{j\sigma}^k a_{j+1\sigma}^{k*}) \end{aligned} \quad (\text{B.20})$$

Veremos no próximo apêndice que:

$$iG_{j(j-1)\sigma}^{+-} = \left\langle c_{(j-1)\sigma}^+ c_{j\sigma} \right\rangle, \quad (\text{B.21})$$

onde  $G^{+-}$  é a função de Green no formalismo de Keldysh. Desta forma a corrente é dada por:

$$I_{(j-1)\sigma} = \frac{et}{\hbar} \left[ G_{j(j-1)\sigma}^{+-} - G_{(j-1)j\sigma}^{-+} \right] \quad (\text{B.22})$$

A expressão B.22 é útil para cálculo da corrente quando o sistema estiver longe do equilíbrio e para tratar problemas de muitos corpos. Detalhes podem ser visto na seção 2.5 (A corrente elétrica e o formalismo de Keldysh).



## C Formalismo de Keldysh.

É conveniente fazermos aqui um pequeno resumo de funções de Green antes de iniciarmos a abordagem em sistemas fora do equilíbrio, usando o formalismo de Keldysh. Neste momento trataremos de sistemas à temperatura nula. Não será nossa intenção apresentarmos o método de Matsubara<sup>39</sup> usado em cálculos com temperatura finita. Claro que sistemas experimentais reais nunca estão a temperatura nula, apesar algumas vezes estarem a temperaturas extremamente baixas. No entanto, cálculos a temperatura nula são muito úteis para descrever sistemas reais, pois frequentemente estes são compreendidos através de seu estado fundamental somado com suas excitações. Mas, o estado fundamental pode ser deduzido através de cálculos à temperatura nula.

Vamos supor que estamos estudando um hamiltoniano que não pode ser resolvido de maneira exata, a abordagem mais usual para este problema é:

$$H = H_0 + V \quad (\text{C.1})$$

onde,  $H_0$  é o hamiltoniano que pode ser resolvido de maneira exata e  $V$  representa todas as outras partes de  $H$ . É comum escolher  $H_0$  de tal maneira que os efeitos de  $V$  sejam pequenos. Logo analisaremos um sistema que pode ser completamente descrito por  $H_0$  e introduziremos o efeito de  $V$  para sabermos como isso altera as propriedades do sistema. Este é basicamente o procedimento adotado em teoria de muitos corpos. Para o estudo de tal teoria é fundamental que o uso das funções de Green. Esta tem a seguinte definição.

$$G(\lambda, t - t') = -i \frac{\langle \phi_0 | T \hat{C}_\lambda(t) \hat{C}_\lambda^\dagger(t') S(\infty, -\infty) | \phi_0 \rangle}{\langle \phi_0 | T S(\infty, -\infty) | \phi_0 \rangle} \quad (\text{C.2})$$

onde:

(i)  $T$  é o operador de ordenação temporal que age em um conjunto de operadores com dependência temporal. Por exemplo,  $T [\hat{V}(t_1) \hat{V}(t_2) \hat{V}(t_3)]$ , o operador  $T$  irá ordenar os outros operadores de tal maneira que o menor tempo fique à direita e o maior à esquerda. Desta forma,

$$T [\hat{V}(t_1) \hat{V}(t_2) \hat{V}(t_3)] = T [\hat{V}(t_3) \hat{V}(t_1) \hat{V}(t_2)] \quad \text{se } t_3 > t_1 > t_2. \quad (\text{C.3})$$

(ii) A matriz  $S$  é definida como:

$$S(t, t') = T \exp \left[ -i \int_{t'}^t dt_1 \hat{V}(t_1) \right]. \quad (\text{C.4})$$

Expandindo a exponencial em série de potências e inserindo-a na função de Green, temos:

$$G(\lambda, t - t') = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^{n+1}}{n!} \times \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \dots \int_{-\infty}^{\infty} dt_n \frac{\langle \phi_0 | T \hat{C}_\lambda(t) \hat{V}(t_1) \hat{V}(t_2) \dots \hat{V}(t_n) \hat{C}_\lambda^\dagger(t') | \phi_0 \rangle}{\langle \phi_0 | S(\infty, -\infty) | \phi_0 \rangle} \quad (\text{C.5})$$

Em relação aos estados, usaremos a seguinte notação:  $|\phi_H\rangle$  será autoestado de  $H$  enquanto  $|\phi_0\rangle$  será o estado fundamental de  $H_0$ . De tal maneira que:

$$|\phi_H\rangle = S(0, -\infty) H_0 |\phi_0\rangle \quad (\text{C.6})$$

Na definição da matriz  $S$ , o tempo é tomado no intervalo de  $(-\infty, \infty)$ . O estado em  $t = -\infty$  é bem definido como o estado fundamental do sistema de partículas não interagentes. As interações são ligadas lentamente, adiabaticamente. Em  $t \sim 0$  o estado fundamental interagente é  $\Psi(0) = S(0, -\infty) \phi_0$ . Em física de matéria condensada o estado  $t \rightarrow \infty$  deve ser definido de maneira cuidadosa. Se as interações continuam a ocorrer, este estado não mais será bem definido através do estado fundamental das partículas não interagentes,  $\phi_0$ .

Schwinger em 1961<sup>40</sup> sugeriu uma outra maneira de lidar com o limite  $t \rightarrow \infty$ . Ele propôs que a integral no tempo da matriz  $S$  contivesse dois intervalos. Um iria de  $(-\infty, \tau)$  e o outro de  $(\tau, -\infty)$ , sendo que  $\tau \rightarrow \infty$ . Isso torna o caminho de integração no tempo um loop, que começa e termina em  $t = -\infty$ , como mostra a fig. (C.1). A vantagem



Figura C.1: Caminho temporal adotado no formalismo de Keldysh.

deste método é que a expansão no tempo da matriz  $S$  começa e termina em um estado conhecido, pois  $\Psi(-\infty) = \phi_0$ , que geralmente é o único estado exatamente conhecido, o estado fundamental.

Para sistemas no equilíbrio, este método de calcular a matriz  $S$ , fornece resultados idênticos ao tomarmos o intervalo de tempo de  $(-\infty, \infty)$ . A grande vantagem é que, quando analisamos a integral no tempo com dois ramos (intervalos), evitamos o estado  $\Psi(\infty)$ , tornando possível tratar de sistemas longe do equilíbrio usando o formalismo de funções de Green. Em 1965, Keldysh<sup>13</sup> foi o primeiro a desenvolver esta teoria de loop no tempo para aplicações em sistemas de estado sólido. Veremos a seguir de uma maneira mais detalhada quais são as novas definições de função de Green quando aplicada esta técnica de loop no tempo.

A matriz  $S$  com esse novo caminho de integração pode ser expressa na seguinte forma.

$$S(-\infty, -\infty) = T_s \exp \left[ -i \int_{loop} ds_1 \hat{V}(s_1) \right] \quad (C.7)$$

Note que temos um novo caminho de integração conforme fig. (C.1) composto por dois ramos. A variável  $s_1$  vai  $(-\infty, \tau)$  e depois, de  $(\tau, -\infty)$ . O operador  $T_s$  é responsável pela ordenação temporal de maneira que o tempo  $s_1$  ocorra sempre primeiramente. Expandindo a matriz  $S$ , as funções de Green podem ser vistas da seguinte forma:

$$G(\lambda, s_1 - s_2) = i \left\langle \phi_0 \left| T_s \hat{C}_\lambda(s_1) \hat{C}_\lambda^\dagger(s_2) \right| \phi_0 \right\rangle \quad (C.8)$$

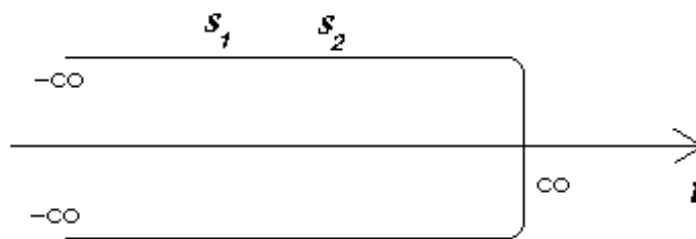


Figura C.2: Caminho temporal adotado no formalismo de Keldysh para a função  $G^{++}$ .

Se ambos  $s_1$  e  $s_2$  estão no ramo superior do loop temporal, o operador ordenação temporal  $T_s$  é idêntico à  $T$ . No entanto, se eles estiverem no ramo inferior,  $T_s$  será o contrário de  $T$ , conhecido como operador anti-ordenação temporal. Outra possibilidade é  $s_1$  e  $s_2$  estarem em ramos diferentes, mas neste caso eles já estarão ordenados. Vamos todas essas possibilidades citadas e definir quatro novas funções de Green usadas no formalismo de Keldysh. Em sistemas longe do equilíbrio, as médias (denotadas por  $\langle n | \dots | n \rangle$ ) são tomadas em qualquer estado quântico do sistema e não necessariamente no estado estacionário como no caso de equilíbrio.

1)

$$G^{++}(t, t') \equiv -i \langle \phi_H | T_s \hat{C}_\lambda(t) \hat{C}_\lambda^\dagger(t') | \phi_H \rangle \quad (\text{C.9})$$

$$G^{++}(t, t') = -i \langle \phi | \hat{C}_\lambda(t) \hat{C}_\lambda^\dagger(t') | \phi \rangle \quad (\text{C.10})$$

que é a própria função de Green causal convencional.

2)

$$G^{+-}(t, t') \equiv -i \langle \phi_H | T_s \hat{C}_\lambda(t) \hat{C}_\lambda^\dagger(t') | \phi_H \rangle \quad (\text{C.11})$$

$$G^{+-}(t, t') = +i \langle \phi | \hat{C}_\lambda^\dagger(t') \hat{C}_\lambda(t) | \phi \rangle \quad (\text{C.12})$$

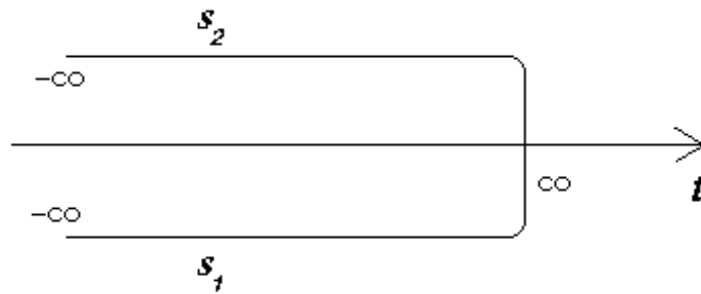


Figura C.3: Caminho temporal adotado no formalismo de Keldysh para a função  $G^{+-}$ .

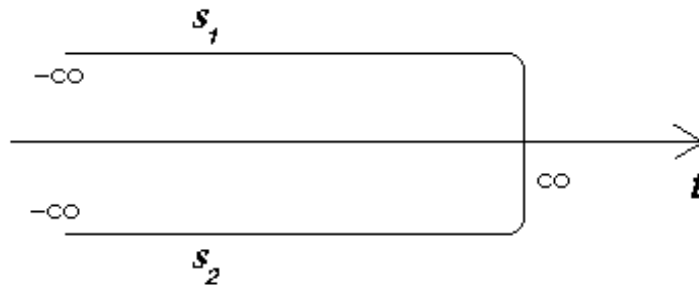


Figura C.4: Caminho temporal adotado no formalismo de Keldysh para a função  $G^{-+}$ .

3)

$$G^{-+}(t, t') \equiv -i \langle \phi_H | T_s \hat{C}_\lambda(t) \hat{C}_\lambda^\dagger(t') | \phi_H \rangle \quad (\text{C.13})$$

$$G^{-+}(t, t') = -i \langle \phi | \hat{C}_\lambda(t) \hat{C}_\lambda^\dagger(t') | \phi \rangle \quad (\text{C.14})$$

As funções de Green  $G^{-+}$  e  $G^{+-}$  nos fornecem as funções de correlação,

$$\langle \phi | \hat{C}_\lambda(t) \hat{C}_\lambda^\dagger(t') | \phi \rangle \quad \text{e} \quad \langle \phi | \hat{C}_\lambda^\dagger(t') \hat{C}_\lambda(t) | \phi \rangle, \quad (\text{C.15})$$

respectivamente. Isto é interessante, pois serão usadas no cálculo da corrente. Note que para  $t = t'$  estas se reduzem às funções espectrais.

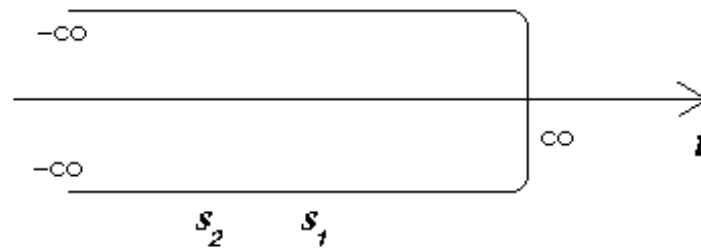


Figura C.5: Caminho temporal adotado no formalismo de Keldysh para a função  $G^{--}$ .

4)

$$G^{--}(t, t') \equiv -i \langle \phi_H | T_s \hat{C}_\lambda(t) \hat{C}_\lambda^\dagger(t') | \phi_H \rangle \quad (\text{C.16})$$

$$G^{--}(t, t') = -i \langle \phi | \bar{T} \hat{C}_\lambda(t) \hat{C}_\lambda^\dagger(t') | \phi \rangle \quad (\text{C.17})$$

onde  $\bar{T}$  é o operador anti-causal, ordena os tempos de maneira inversa que  $T$ . Portanto,  $G^{--}(t, t')$  é a função de Green anti-causal.

Mais duas funções ainda devem ser definidas, são elas as funções de Green avançadas e retardadas.

$$G^r(t, t') = -i\theta(t - t') \langle \phi | \hat{C}_\lambda(t) \hat{C}_\lambda^\dagger(t') | \phi \rangle \quad (\text{C.18})$$

$$G^a(t, t') = i\theta(t - t') \langle \phi | \hat{C}_\lambda(t) \hat{C}_\lambda^\dagger(t') | \phi \rangle \quad (\text{C.19})$$

Em 1968<sup>41</sup>, Craig sugeriu uma notação matricial para o formalismo de Keldysh, tanto as funções de Green quanto as autoenergias são representadas por matrizes  $2 \times 2$ , da seguinte forma:

$$\tilde{G} = \begin{pmatrix} G^{++} & G^{+-} \\ G^{-+} & G^{--} \end{pmatrix} \quad (\text{C.20})$$

Em particular, se verifica a equação de Dyson:

$$\tilde{G} = \tilde{g} + \tilde{g} \tilde{\Sigma} \tilde{G} \quad (\text{C.21})$$

onde as  $G$ 's e  $g$ 's são respectivamente as funções de Green perturbadas e não perturbadas e as autoenergias  $\tilde{\Sigma}$  são dadas por:

$$\tilde{\Sigma} = \begin{pmatrix} \Sigma^{++} & \Sigma^{+-} \\ \Sigma^{-+} & \Sigma^{--} \end{pmatrix} \quad (\text{C.22})$$

que satisfazem a relação  $\Sigma^{++} + \Sigma^{--} = -(\Sigma^{+-} + \Sigma^{-+})$

As quatro funções de Green e as autoenergias não são independentes, existindo uma relação entre elas,

$$G^{--} + G^{++} = G^{-+} + G^{+-}. \quad (\text{C.23})$$

É possível obter as funções de Green avançada e retardada a partir de  $G^{++}$ ,  $G^{+-}$ ,  $G^{-+}$ ,  $G^{--}$ . As funções de Green avançadas e retardadas satisfazem a equação de Dyson em separado, e se relacionam da seguinte forma:

$$G^r = G^{++} - G^{+-} = -G^{--} + G^{-+} \quad (\text{C.24})$$

$$G^a = G^{++} - G^{-+} = -G^{--} + G^{+-} \quad (\text{C.25})$$

Isto pode ser visto de uma maneira mais compacta mediante uma transformação canônica que nos levam de  $G^{++}$ ,  $G^{+-}$ ,  $G^{-+}$ ,  $G^{--}$  a  $G^r$  e  $G^a$ . Esta transformação pode ser expressa da seguinte forma:

$$\tilde{G}' = \frac{1 - i\hat{\sigma}_y}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} G^{++} & G^{+-} \\ G^{-+} & G^{--} \end{pmatrix} \frac{1 + i\hat{\sigma}_y}{\sqrt{2}} = \begin{pmatrix} 0 & G^a \\ G^r & G^F \end{pmatrix} \quad (\text{C.26})$$

onde

$$\hat{\sigma}_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad (\text{C.27})$$

sendo

$$G^F = G^{++} + G^{--} = G^{+-} + G^{-+}. \quad (\text{C.28})$$

De maneira análoga aplicamos a mesma transformação nas autoenergias.

$$\tilde{\Sigma}' = \frac{1 - i\hat{\sigma}_y}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \Sigma^{++} & \Sigma^{+-} \\ \Sigma^{-+} & \Sigma^{--} \end{pmatrix} \frac{1 - i\hat{\sigma}_y}{\sqrt{2}} = \begin{pmatrix} \Omega & \Sigma^r \\ \Sigma^a & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{C.29})$$

onde,

$$\Sigma^r = \Sigma^{++} - \Sigma^{+-} = -(\Sigma^{--} + \Sigma^{-+}),$$

$$\Sigma^a = \Sigma^{++} - \Sigma^{-+} = -(\Sigma^{--} + \Sigma^{+-}),$$

e

$$\Omega = \Sigma^{++} - \Sigma^{--} = -(\Sigma^{+-} + \Sigma^{-+}).$$

Com isso é possível comprovar que as funções de Green  $G^a$  e  $G^r$  satisfazem a equação de Dyson.

$$\hat{G}^r = \hat{g}^r + \hat{g}^r \hat{\Sigma}^r \hat{G}^r \quad (\text{C.30})$$

$$\hat{G}^a = \hat{g}^a + \hat{g}^a \hat{\Sigma}^a \hat{G}^a \quad (\text{C.31})$$

Por último, vamos apresentar uma relação entre as funções de Green que tornam todo este formalismo muito interessante, pois será usada para o cálculo autoconsistente



da carga e também para a corrente, conforme pode ser visto na seção de corrente elétrica e formalismo de Keldysh.

$$\begin{cases} G^{+-} = (1 + G^r \Sigma^r) g^{+-} (1 + G^a \Sigma^a) - G^r \Sigma^{+-} G^a \\ G^{-+} = (1 + G^r \Sigma^r) g^{-+} (1 + G^a \Sigma^a) - G^r \Sigma^{-+} G^a \end{cases} \quad (\text{C.32})$$

Esta é encontrada com a aplicação da eq. C.26, da seguinte forma:

$$G^{-+} = g^{-+} + \frac{1}{2} \left\{ \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix} \tilde{g}' \tilde{\Sigma}' \hat{G}' \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \right\}^{-+}, \quad (\text{C.33})$$

sendo:

$$\tilde{g}' = \begin{pmatrix} 0 & g^a \\ g^r & g^F \end{pmatrix}, \quad \tilde{\Sigma}' = \begin{pmatrix} \Omega & \Sigma^r \\ \Sigma^a & 0 \end{pmatrix} \quad \text{e} \quad \hat{G}' = \begin{pmatrix} 0 & G^a \\ G^r & G^F \end{pmatrix}. \quad (\text{C.34})$$

Com a da eq. C.32 aplicada a sítios, conforme procedimento Apêndice A, é possível calcular  $G_{22}^{+-}$  ligando dois sítios vizinhos. Após alguma álgebra temos que:

$$\hat{G}_{22}^{+-} = \left[ \left( I + \hat{G}^r \hat{\Sigma}^r \right) \hat{g}^{+-} \left( I + \hat{G}^a \hat{\Sigma}^a \right) \right]_{22} \quad (\text{C.35})$$

que, integrada, fornece o número de ocupação de cada spin  $n_\sigma$ .



## Referências

- [1] C. T. Foxon, B. A. Joyce, “Growth of thin films and heterostructures of III-V compounds by molecular beam epitaxy”, in Growth and Characterization of Semiconductors, ed. by R. A. Strading, P. C. Klipstein (Hilger, 1990) p.35.
- [2] H. L. Störmer, R. Dingle, A.C. Gossard, W. Wiegmann, and R. A. Logan, Conf. Series - Inst. Phys. **43**, 557 (1979).
- [3] H. L. Störmer, R. Dingle, A.C. Gossard, W. Wiegmann, and R. A. Logan, “Electronic Properties of modulation-doped  $GaAs - Ga_{1-x}Al_xAs$  Superlattices”, in Physics of Semiconductors 1978, ed. by B. L. H. Wilson (Inst. Phys. Bristol 1979) pp. 557-560.
- [4] Tsuneya Ando, Alan B. Fowler, Frank Stern, Rev. Mod. Phys. **54**, 437 (1982).
- [5] Sadao Adachi, “GaAs and Related Materials”, (World Scientific 1994).
- [6] T. Ando, Y. Arakawa, K. Furuya, S. Komiyama, H. Nakashima, Mesoscopic Physics and Electronics, (Springer 1998).
- [7] Yoseph Imry, Introduction to Mesoscopic Physics, (Oxford University Press 1997).
- [8] S. Datta, Electronic Transport in Mesoscopic Systems, Cambridge U. Press, UK 9 (1995).
- [9] I. Zutic, J. Fabian, and S. Das Sarma Rev. Mod. Phys. **76**, 323-410 (2004).
- [10] David K. Ferry, Stephen M. Goodnick, Transport in nanostructures, Cambridge Studies in Semiconductor Physics and Microelectronics:6, ed. H. Ahmed, M. Pepper, A. Broers, (Cambridge University Press 1997).
- [11] C. W. J. Beenaker and H. van Houten, “Quantum transport in Semiconductor Nanostructures”, in Solid State Physics vol. 44, Eds. Henry Ehrenreich, David Turnbull, (Academic Press 1991).
- [12] E. I. Rashba, Fiz. Tverd. Tela (Leningrad) **2**, 1224(1960) [Solid State Ionics **2**, 1109 (1960)].
- [13] L. Keldysh, Sov. Phys. JETP **20**, 1018 (1965).

- [14] J. Rammer, H. Smith, *Rev. Mod. Phys.* **58**, 323 (1986).
- [15] H. Haug, A. P. Jauho, *Quantum Kinetics in Transport and Optics in Semiconductors*, (Springer-Verlag 1996).
- [16] Gerald D. Mahan, *Many Particle Physics* (Kluwer Academic/ Plenum Publishers, New York, 2000).
- [17] E. M. Lifshitz and L.P. Pitaevskii, *Physical Kinetics* (Butterworth Heinemann, Moscow, 1979).
- [18] F. Mireles and G. Kirczenow, *Phys. Rev. B.* **64**, 024426 (2001).
- [19] R. M. Potok, C. M. Marcus, V. Umansky, M. Hanson, and A. C. Gossard, *Phys. Rev. Lett.* **91**, Number 1 (2003).
- [20] Yu Zhu, Tsung-han Lin and Qing-feng Sun, *Phys. Rev. B.* **69**, 1211302 (2004).
- [21] Mandar M. Deshmukh and D. C. Ralph, *Phys. Rev. Lett.* **89**, Number 26 (2002).
- [22] M. A. Kastner, *Rev. Mod. Phys.* **64**, 849 (1992).
- [23] Anda, E. V. and Flores, F. J. *Phys. Cond. Matter*, **2**, 8023 (1991).
- [24] E. U. Condon and G. H. Shortley, *Theory of Atomic Spectra* (Cambridge University Press 1935) p.129.
- [25] R. J. Elliot, *Phys. Rev.* **96**, 266 (1954).
- [26] M. I. D'yakonov and V. I. Perel, *Sov. Phys. JETP* **33**, 1053 (1971).
- [27] G. L. Bir, A. G. Aronov and G. E. Pikus, *Sov. Phys. JETP* **42**, 705 (1976).
- [28] Y. A. Bychkov and E. I. Rashba, *J. Phys. C* **17**, 6039 (1984).
- [29] J. Hubbard, *Proc. Roy. Soc.* **A276**, 238 (1963).
- [30] P. W. Anderson, *Phys. Rev.* **124**, 41 (1961).
- [31] J. Nitta, T. Akasaki, H. Takayanagi, and T. Enoki, *Phys. Rev. Lett.* **78**, 1335 (1997).
- [32] D. Grundler, *Phys. Rev. Lett.* **84**, 6074 (2000).

- [33] T. Matuyama, R. Kursten, C. Messner, and U. Merkt, *Phys. Rev. B* **61**, 15 588 (2000).
- [34] M. Rasetti, *The Hubbard Model*, World Scientific, Singapore (1991).
- [35] S. A. Wolf, D. D. Awschalom, R.A. Buhrman, L. M. Daughton, *Science* **294**, 1488 (2001).
- [36] P. Recher, E. V. Sukhorukov, and D. Loss, *Phys. Rev. Lett.* **85**, 1962 (2000).
- [37] S. S. Makler, M. A. Boselli, J. Weberszpil, X. F. Wang and I. C. da Cunha Lima, *Physica B* **320** (2002) 396-399.
- [38] I. Camps, S. S. Makler, H. M. Pastawski, and L. E. F. Foa Torres, *Physical Review B*, Volume **64**, 125311.
- [39] T. Matsubara, *Prog. Theor. Phys. (Kyoto)***14**, 351 (1955).
- [40] J. J. Schwinger, *J. Math. Phys.* **2**, 407 (1961).
- [41] R. Craig, *J. Math. Phys.* **9**, 605 (1968).
- [42] C. M. Hu, J. Nitta, A. Jensen, J. B. Hansen and H. Takayanagi, *Phys. Rev. B* **63**, 125333 (2001).
- [43] S. Datta and B. Das, *Appl. Phys. Lett.* **56**, 665 (1990).