

**André Telles da Cunha Lima**

**Efeitos de Spin e Correlação em Transporte Nanoscópico**

**Tese de Doutorado**

Tese apresentada ao Programa de Pós Graduação em Física do Departamento de Física da PUC-Rio como parte dos requisitos parciais para obtenção do título de Doutor em Física.

Orientador: Enrique Victoriano Anda  
Co-orientador: Sergio Saul Makler

Rio de Janeiro

**André Telles da Cunha Lima**

## **Efeitos de Spin e Correlação em Transporte Nanoscópico**

Tese apresentada como requisito parcial para obtenção do grau de Doutorado pelo programa de Pós-Graduação em Física do Departamento de Física do Centro Técnico Científico da PUC-Rio. Aprovada pela Comissão Examinadora abaixo assinada.

**Prof. Enrique Victoriano Anda**

Orientador

Departamento de Física – PUC-Rio

**Prof. Carlos Maurício Giesbrecht Ferreira Chaves**

Departamento de Física – PUC-Rio

**Prof. Maria Augusta Martins Davidovich**

Departamento de Física – PUC-Rio

**Prof. Caio Henrique Lewenkopf**

Instituto de Física – UERJ

**Prof. Marcos Sergio Figueira da Silva**

Instituto de Física – UFF

**Prof. Sergio Saul Makler**

Instituto de Física – UFF



Todos os direitos reservados. É proibida a reprodução total ou parcial do trabalho sem autorização da universidade, do autor e do orientador.

## **André Telles da Cunha Lima**

Graduou-se em Física na Universidade de São Paulo em 1997. Cursou o Mestrado na área de Física do Estado Sólido – Física com conclusão em 2000 na Universidade Estadual do Rio de Janeiro.

### Ficha Catalográfica

<p>Telles da Cunha Lima, André</p> <p>Efeitos de Spin e Correlação em Transporte Nanoscópico/ André Telles da Cunha Lima; orientador: Enrique Victoriano Anda. – Rio de Janeiro: PUC, Departamento de Física, 2005 .</p> <p>101 f.:il. ; 30 cm</p> <p>1. Tese (Doutorado) – Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro, Departamento de Física.</p> <p>Inclui referências bibliográficas.</p> <p>1. Física - Teses. 2. Pontos quânticos. 3. Transporte quântico . 4. Efeito Rashba I. Anda , Enrique. II. Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro, Departamento de Física. III. Título.</p>
--

CDD: 530



A Claudia, minha Vidinha.



## Agradecimentos

São vários os agradecimentos que devo fazer. Espero neste momento não esquecer de nenhum deles.

- Ao CNPq pelo suporte financeiro.
- Aos colegas de sala: Marcelo, Luis, Felipe, Lourival e Edson.
- Às secretárias Marcia e Giza por serem sempre tão solidárias.
- Aos professores que transmitiram preciosos conhecimentos nas aulas da PUC e do CBPF.
- A Guta por ser um verdadeiro exemplo de força e garra.
- A Pedro Orellana por ter me acolhido de maneira carinhosa durante o tempo que passei na Universidade Católica de Antofagasta no Chile, onde produzimos a última parte deste trabalho. Aproveito a oportunidade para agradecer a todo o departamento de Física de tal Universidade.
- A Sergio Makler por ter assumido a responsabilidade de me orientar em um momento crítico da produção deste trabalho. Obrigado pela sua paciência, por ter sido tão criterioso e detalhista de maneira simpática e amiga.
- A Enrique Anda por ter me guiado ao longo de todo este caminho, por me dar a oportunidade de desenvolver este trabalho e por ter orientado esta tese de maneira profissional e agradável.
- A minha irmã Suzana e ao meu cunhado Edson que mesmo estando tão longe conseguiam



– A meus pais por terem sido verdadeiros educadores durante minha vida e por me darem todo o suporte psicológico para conseguir chegar no final desta tese da maneira mais sã possível. Um agradecimento especial ao meu pai, Ivan da Cunha Lima, pessoa pela qual tenho enorme admiração por representar, para mim, um grande exemplo profissional e pessoal.

– A meus filhos, Thais e Bruno, por terem compreendido o significado deste trabalho para mim e por saberem que apesar da minha constante ausência, sempre estiveram presentes em minha mente e meu coração.

– Por último, agradeço a minha esposa, Claudia, a qual carinhosamente chamo de Vidinha. Você é meu porto seguro. Quando ventos sopram com fúria e ondas batem fazendo tudo estremecer, seus ombros e suas palavras doces me acalmam e lembram que no outro dia só restará um lindo amanhecer. Obrigado.

## Resumo

Telles da Cunha Lima, André; Anda, Enrique Victoriano (Orientador) **Efeitos de Spin e Correlação em Transporte Nanoscópico**. Rio de Janeiro, 101p. Tese de Doutorado – Departamento de Física, Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro.

Investigamos as propriedades de transporte de spin polarizado através de um ponto quântico conectado a dois terminais. A corrente elétrica que circula em nosso sistema pode ter sua polarização modulada através de um potencial de porta que controla o acoplamento spin-órbita (efeito Rashba). Nós estudamos o efeito de polarização do spin em um transistor constituído por um ponto quântico em que suas energias podem ser controladas através de um outro potencial de porta que opera apenas na região de confinamento.

O alto grau de confinamento e correlação entre as cargas dão origem a fenômenos físicos interessantes que descreveremos neste trabalho. Nós demonstramos que através da manipulação de um potencial externo é possível controlar de uma maneira extremamente eficiente a intensidade e a polarização da corrente através do sistema. Outro parâmetro importante que iremos manipular para uma compreensão detalhada do sistema é o campo elétrico externo.

Na segunda parte deste trabalho, estudamos a evolução temporal da função de onda, suposta inicialmente como um pacote de onda circulando nosso sistema composto por um ponto quântico. Podemos comprovar efeitos de tunelamento ressonante e efeitos de interferência de nosso pacote inicial ao longo do tempo e além disso, estudamos também efeitos de interação spin-órbita na polarização de nosso pacote de onda.



## Abstract

Telles da Cunha Lima, André; Anda, Enrique Victoriano (Advisor) **Spin and Correlation Effects in Nanoscopic Transport**. Rio de Janeiro, 101p. Doctoral Thesis – Departamento de Física, Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro.

We investigated spin polarized transport properties through a quantum dot connected with two terminals. An electric current that circulates in our system can have its polarization modulated with an external potential that controls the spin orbit coupling (Rashba effect). We studied the effect of spin polarization in a transistor constituted by a quantum dot where its energies can be controlled with a gate potential that operates only in the confinement region.

The high confinement and correlation between the charges give rises to interesting phenomena that we describe in this work. We demonstrate that tuning an external potential it is possible to control with a extremely efficient precision the intensity and the polarization of the current through this system. Another important parameter that we used to better understand this system was the external electric field.

In the second part of this work, we studied the time evolution of a wave function supposed to be initially a wave package circulating our system composed by a quantum dot. We can prove resonant tunneling effects and interference effects in such a wave package as time goes by and we also studied spin orbit interaction effects on the polarization of the carrier.

## Keywords

Quantum Dots; Quantum Transport; Rashba Effect



## Sumário

1	Introdução	1
1.1	Ponto Quântico (PQ)	4
1.2	Tunelamento Ressonante	6
1.3	Interação spin-órbita e efeito Rashba	9
2	O modelo	11
2.1	O hamiltoniano de impureza de Anderson	11
2.2	O hamiltoniano de Rashba	12
2.3	As funções de Green	17
2.4	Aplicação da função de Green ao modelo adotado.	20
2.5	A corrente elétrica e o formalismo de Keldysh	23
3	Transporte perto do equilíbrio e longe do equilíbrio	29
3.1	Cálculo da carga e condutância sob campo elétrico infinitesimal	29
3.1.1	Ausência de campo magnético e correlação.	29
3.1.2	Campo magnético na ausência de correlação.	31
3.1.3	Campo magnético e correlação	33
3.2	Longe do equilíbrio (campo elétrico finito)	34
3.2.1	Introdução	34
3.2.2	Efeito na ausência do campo magnético e de correlação	35
3.2.3	Efeito da correlação na ausência do campo magnético	36
3.2.4	Efeito do campo magnético na ausência de correlação	38
3.2.5	Efeito de correlação e campo magnético finito	40
4	Fenômenos Temporais	45
4.1	Equação de movimento do pacote	45

4.2.1	Controle de polarização com $U = 0$	57
4.2.2	Processo de leitura com $U \neq 0$	71
5	Conclusões	79
A	Semicadeia e cadeia infinita.	81
B	A corrente	85
C	Formalismo de Keldysh.	89
	Referências	99

## Lista de Figuras

1.1	Representação de uma heteroestrutura semicondutora formando um ponto quântico.	5
1.2	Diagrama de níveis de uma dupla barreira submetida a um campo elétrico.	7
1.3	Heteroestrutura semicondutora de dupla barreira. A figura mostra duas camadas representando barreiras (de cor mais clara) e uma camada entre elas onde se situa o poço quântico.	8
2.1	Modelo de sítios	16
2.2	Modelo de sítios constituído por duas semicadeias representando o contato e o PQ.	20
2.3	Modelo de sítios para o cálculo da corrente.	23
2.4	Representação da cadeia com apenas cinco sítios	26
2.5	Modelo da cadeia adotado para o cálculo de $G_{24\sigma}$ .	27
3.1	Diagrama de níveis na ausência de campo elétrico.	30
3.2	Carga no PQ versus potencial de porta para $U = 0eV$ , $\Delta = 0eV$ .	30
3.3	Condutância versus potencial de porta para $U = 0eV$ , $\Delta = 0eV$ .	31
3.4	Carga no PQ versus potencial de porta para $U = 0eV$ , $\Delta = 0.2eV$ .	32
3.5	Condutância versus potencial de porta para $U = 0eV$ , $\Delta = 0.2eV$ .	33
3.6	Condutância versus potencial de porta para $U = 0.5eV$ , $\Delta = 0.2eV$ .	34
3.7	Carga versus potencial de porta com correlação e campo magnético.	35
3.8	Diagrama de níveis na presença de campo elétrico.	36
3.9	Representação simplificada da densidade de estados das semicadeias e do estado localizado do PQ.	37
3.10	Carga versus diferença de potencial para o caso $U = 0$ , $\Delta = 0$ .	37
3.11	Corrente versus diferença de potencial para o caso $U = 0$ , $\Delta = 0$ .	38
3.12	Carga versus diferença de potencial para o caso $U = 0.05$ e $\Delta = 0$ .	39
3.13	Corrente versus diferença de potencial para o caso $U = 0.05$ e $\Delta = 0$ .	39
3.14	Carga versus diferença de potencial para o caso $U = 0$ e $\Delta = 0.02$ .	40



3.16 Carga versus diferença de potencial para o caso $U = 0.05$ e $\Delta = 0.02$ .	42
3.17 Carga versus diferença de potencial para o caso $U = 0.1$ e $\Delta = 0.02$ .	42
3.18 Corrente versus diferença de potencial para o caso $U = 0.05$ e $\Delta = 0.02$ .	43
3.19 Corrente versus diferença de potencial para o caso $U = 0.1$ e $\Delta = 0.02$ .	43
4.1 Configuração de estados de uma cadeia linear com estados intermediários.	50
4.2 Configuração com o sistema dizimado	50
4.3 Representação dos hoppings renormalizados.	51
4.4 Esquema sintético de uma cadeia renormalizada.	51
4.5 Modelo de sítios com apenas um canal de spin, contendo o PQ localizado no centro e suas energias desdobradas devido à interação coulombiana sem a presença de interação spin-órbita.	52
4.6 Modelo de sítios mostrando a possibilidade de troca de canais.	54
4.7 Modelo de sítios sem interação spin-órbita.	55
4.8 Modelo de sítios com interação spin-órbita.	55
4.9 Modelo de tunelamento do pacote de onda.	56
4.10 Os canais de spin desacoplados.	58
4.11 Evolução temporal do pacote sem PQ.	59
4.12 Efeito de tunelamento do pacote de onda na presença de um PQ localizado no centro da cadeia.	59
4.13 Parte do pacote que foi refletido.	60
4.14 Reflexão total do pacote de onda, condições que não permitem tunelamento.	61
4.15 Interação spin-órbita entre os sítios 199 e 201.	62
4.16 Coeficiente de transmissão da carga em função da interação spin-órbita.	62
4.17 Modelo de sítios com interação spin-órbita.	63
4.18 Coeficiente de transmissão da carga em função da interação spin-órbita sendo que o efeito spin-órbita está ligado entre o PQ e seus primeiros vizinhos e $t' = 0.45$ , isto é, o pacote está em ressonância.	64
4.19 Coeficiente de transmissão da carga em função da interação spin-órbita sendo que o	

4.20 Modelo de sítios com interação spin-órbita entre os sítios 175 e 225.	65
4.21 Coeficiente de transmissão da carga em função da interação spin-órbita sendo que o efeito spin-órbita está ligado entre os sítios 175 e 225 e $t' = 0.1$ .	65
4.22 Coeficiente de transmissão da carga em função da interação spin-órbita sendo que o efeito spin-órbita está ligado entre os sítios 150 e 250 e $t' = 0.1$ .	66
4.23 Coeficiente de transmissão da carga em função da interação spin-órbita sendo que o efeito spin-órbita está ligado entre os sítios 175 e 225 e $t' = 0.45$ .	67
4.24 Modelo de sítios com interação spin-órbita entre os sítios 150 e 250.	68
4.25 Coeficiente de transmissão da carga em função da interação spin-órbita sendo que o efeito spin-órbita está ligado entre os sítios 150 e 250 e $t' = 0.45$ .	68
4.26 Coeficiente de transmissão da carga em função da interação spin-órbita sendo que o efeito spin-órbita está ligado entre os sítios 175 e 225 e $t' = 0.2$ .	69
4.27 Coeficiente de transmissão da carga em função da interação spin-órbita sendo que o efeito spin-órbita está ligado entre os sítios 150 e 250 e $t' = 0.2$ .	70
4.28 Evolução temporal da carga no ponto quântico.	70
4.29 Representação de um pacote de onda emitido pelo lado esquerdo do sistema e de uma dupla barreira com dois estados localizados gerados pela interação Coulombiana.	71
4.30 Diagrama de ressonância entre o pacote de onda e o PQ quando é aplicado um potencial de porta $V_g$ .	72
4.31 Evolução temporal da carga com spin para baixo quando o PQ está carregado com uma carga com spin para cima.	73
4.32 Evolução temporal da carga com spin para cima quando o PQ está carregado com uma carga com spin para cima.	73
4.33 Ampliação feita entre os sítios 20 e 190 do pacote de onda refletido pelo PQ.	74
4.34 Modelo tridimensional da evolução da carga com spin para cima sendo refletida pelo PQ ocupado por um elétron com spin para cima.	74
4.35 Modelo tridimensional da carga com spin para baixo tunelando o PQ ocupado por um elétron com spin para cima.	75
4.36 Variação da corrente em relação à energia do estado localizado com o PQ carregado com spin para cima e os dois pacotes de onda, p/cima e p/baixo sendo enviados	

4.37 Polarização versus interação spin-órbita	77
A.1 Modelo de sítios ligando um sítio isolado a uma semicadeia.	81
A.2 Densidade de estados de uma semicadeia.	83
A.3 Modelo de sítios ligando duas semicadeias.	83
A.4 Densidade de estados de uma cadeia infinita.	84
C.1 Caminho temporal adotado no formalismo de Keldysh.	91
C.2 Caminho temporal adotado no formalismo de Keldysh para a função $G^{++}$ .	92
C.3 Caminho temporal adotado no formalismo de Keldysh para a função $G^{+-}$ .	93
C.4 Caminho temporal adotado no formalismo de Keldysh para a função $G^{-+}$ .	93
C.5 Caminho temporal adotado no formalismo de Keldysh para a função $G^{--}$ .	94