

## 2

# Transporte Nanoscópico em sistemas fortemente correlacionados. Pontos Quânticos

## 2.1 Descrição física do sistema

Apresentaremos neste trabalho um estudo das propriedades físicas e de transporte de um sistema constituído de uma molécula artificial diatômica submetida a uma diferença de potencial externa. Cada átomo desta molécula é representado por um PQ e a diferença de potencial a qual o sistema está submetido é estabelecida conectando-se o sistema a dois reservatórios de elétrons. Por sua vez, cada reservatório é representado por uma semicadeia infinita de átomos e possui uma determinada energia de Fermi. Duas topologias são consideradas para o sistema: uma, representada na figura (2.1), na qual os PQ's estão dispostos em paralelo com relação aos reservatórios e outra, na figura (2.2), na qual estão dispostos em série. Para ambas o Hamiltoniano que descreve o sistema é dividido em duas partes,

$$H = H_0 + H_1, \quad (2.1)$$

uma parte local  $H_0$  que descreve os PQ's isolados e uma parte de perturbação  $H_1$  que descreve os reservatórios, suas conexões com os PQ's e a conexão entre os PQ's, quando houver.

As componentes local e de perturbação do Hamiltoniano são dadas por

$$H_0 = \sum_{\substack{i=1 \\ \sigma}}^2 \epsilon_i n_{i\sigma} + \frac{1}{2} \sum_{\substack{i=1 \\ \sigma}}^2 U^i n_{i\sigma} n_{i\bar{\sigma}} + U^{(1)(2)} \sum_{\sigma\sigma'} n_{1\sigma} n_{2\sigma'} \quad (2.2)$$

e

$$H_1 = \sum_{\substack{i,j \\ \sigma}} t_{ij} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma}, \quad (2.3)$$

respectivamente. Os termos  $\epsilon_i$ ,  $U^i$  e  $U^{(1)(2)a}$  representam, respectivamente, a energia do estado localizado no PQ  $i$ , a interação coulombiana local neste PQ e a interação entre elétrons de PQ's diferentes<sup>22</sup>. Consideramos neste caso apenas interações entre sítios primeiros vizinhos de modo que, por exemplo, elétrons localizados nos PQ's não interagem com elétrons das semi-cadeias

---

<sup>a</sup>Considerando os PQ's como pequenas esferas, construídas de um material cuja permissividade seja aproximadamente dez vezes maior que a do vácuo, estimamos valores típicos da ordem de 3mV para as interações locais  $U_i$  e de 0.6mV para as não locais  $U_{12}$ .

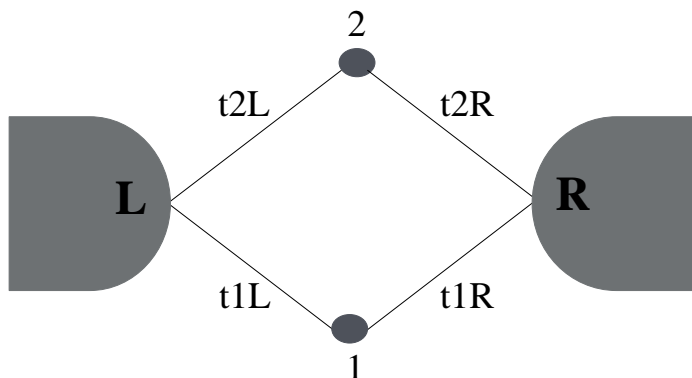


Figura 2.1: Pontos quânticos conectados em paralelo com dois reservatórios de elétrons.

que constituem os reservatórios. Os termos  $t_{ij}$  de  $H_1$ , por sua vez, são conhecidos como termos de “hopping” e correspondem a energia associada a propagação eletrônica entre os sítios  $i$  e  $j$ .

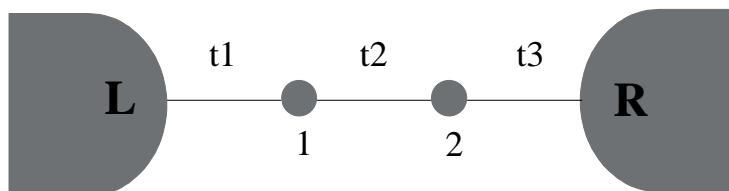


Figura 2.2: Pontos quânticos conectados em série com dois reservatórios de elétrons.

No caso em que os PQ's estão associados em série, existem termos de hopping que estabelecem uma conexão direta entre eles. No entanto, para tornar o sistema mais tratável do ponto de vista matemático, estes termos são considerados nulos em  $H_0$  e introduzidos somente quando, por um processo de renormalização<sup>23,24</sup>, estivermos considerando a conexão dos PQ's com os reservatórios. Desta forma a componente local do hamiltoniano para as topologias em série e em paralelo ficam iguais, permitindo um tratamento em comum no que se refere aos PQ's isolados.

## 2.2 Funções de Green Retardadas e Avançadas

Para estudar o transporte através das estruturas que descrevemos na seção anterior utilizamos um formalismo de funções de Green. Estas funções estão relacionadas ao hamiltoniano de partes do sistema (ou de todo ele) e, no caso de poderem ser obtidas de forma direta, sem nenhum tipo de aproximação, incorporam toda a sua física. Dentre várias existentes trabalhamos basicamente com as funções de Green

$$G_{ij}^R(t, t') = \langle \langle \{c_i(t); c_j^\dagger(t')\} \rangle \rangle = -i\theta(t - t') \langle [c_i(t), c_j^\dagger(t')]_+ \rangle \quad (2.4)$$

$$G_{ij}^A(t, t') = \langle \langle \{c_i(t); c_j^\dagger(t')\} \rangle \rangle = i\theta(t' - t) \langle [c_i(t), c_j^\dagger(t')]_+ \rangle, \quad (2.5)$$

conhecidas, respectivamente, como funções de Green retardadas e avançadas. Nestas funções  $c_j^\dagger$  e  $c_i$  são operadores de construção e destruição e representam a criação de um elétron no sítio  $j$  no instante  $t'$  e sua destruição no sítio  $i$  no instante  $t$ . Por estarmos lidando com férmions estes operadores obedecem a relação de anti-comutação  $[c_i(t), c_j^\dagger(t')]_+$  que aparece nas definições de  $G_{ij}^A$  e  $G_{ij}^R$ . A função  $\theta(t)$  é conhecida como função degrau e vale 1 para  $t > 0$  e zero para  $t < 0$ . Com o sistema em equilíbrio a dependência temporal de  $G_{ij}^R$  e  $G_{ij}^A$  se dá apenas através de  $t - t'$ , de modo que, neste regime, representaremos estas funções simplesmente por  $G_{ij}$ . Na parte final deste capítulo veremos que a componente de Fourier do elemento diagonal das funções de Green de equilíbrio obtidas para o sistema completo fornecem, a partir de suas partes imaginárias, as densidades de estados nos PQ's e nos permitem, através de um processo auto-consistente, calcular o valor de suas cargas.

## 2.3 Funções de Green para os reservatórios de elétrons

Como havíamos dito no início deste capítulo, cada reservatório é representado por uma semicadeia infinita de átomos. Utilizaremos a simetria existente nestas semicadeias para obter as funções de Green para estes reservatórios. Para o reservatório da esquerda podemos escrever a função de Green

$$G_{11} = g_1 + g_1 t G_{L1}, \quad (2.6)$$

onde  $t$  é o termo de “hopping” da semicadeia,  $G_{L1}$  uma função de Green que descreve a propagação entre  $L$  e 1, e  $g_1$  a função de Green de um corpo do sítio 1, representada por

$$g_1(\omega) = \frac{1}{2\pi} \frac{1}{\omega - \epsilon_1 - i\eta}. \quad (2.7)$$

Para  $G_{L1}$  temos

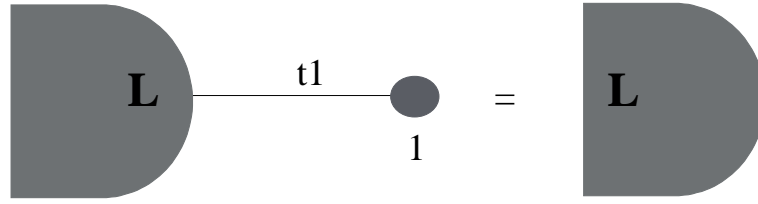


Figura 2.3: Ponto quântico conectado ao reservatório da esquerda. Simetria de translação.

$$G_{L1} = \tilde{g}_L t G_{11}, \quad (2.8)$$

onde  $\tilde{g}_L$  é a função de Green da borda da semicadeia da esquerda. Substituindo (2.8) em (2.6) e isolando  $G_{11}$  obtemos

$$G_{11} = \frac{g_1}{1 - t^2 g_1 \tilde{g}_L}. \quad (2.9)$$

Como o fato de acrescentar mais um átomo numa cadeia semi-infinita não pode mudar o resultado da função de Green de sua borda, podemos dizer que a função de Green  $G_{11}$  para o sistema constituído pelo reservatório da esquerda, que está conectado ao PQ 1, é igual a função de Green  $\tilde{g}_L$ . Considerando isso na equação (2.9) obtemos

$$\tilde{g}_L(\omega) = \frac{1 \pm \sqrt{1 - 4t^2 g_1^2}}{2t^2 g_1}. \quad (2.10)$$

Trabalhando de forma análoga obtemos que a função de Green para o reservatório da direita é dada por

$$\tilde{g}_R(\omega) = \frac{1 \pm \sqrt{1 - 4t^2 g_2^2}}{2t^2 g_2}, \quad (2.11)$$

com  $t$  representando o termo de hopping da semicadeia da direita e

$$g_2(\omega) = \frac{1}{2\pi} \frac{1}{\omega - \epsilon_2 - i\eta} \quad (2.12)$$

a função de Green de um corpo do sítio 2 isolado.

## 2.4 Determinação das funções de Green: Método de equação de movimento

As funções de Green para o sistema são obtidas a partir de equações de movimento<sup>17,18</sup>. A metodologia utilizada para as duas topologias que

estamos considerando consiste em encontrar o que chamamos de funções de Green despidas correspondentes a uma parte isolada do sistema e, logo em seguida, através de um processo de renormalização, embeber estas funções com os termos correspondentes às demais partes do sistema. As funções renormalizadas serão chamadas de funções de Green vestidas<sup>23</sup>. A partir destas calcularemos as cargas e as densidades de estados(DOS) em cada PQ<sup>17,18</sup>, o que nos permitirá estudar certas propriedades do sistema como, por exemplo, o bloqueamento de Coulomb.

Antes de começarmos a trabalhar com as equações de movimento e iniciarmos os cálculos das funções de Green vamos definir os operadores<sup>22</sup>

$$A_{1\sigma}^{\alpha\beta\gamma} = c_{1\sigma} n_{1\sigma}^{\alpha} n_{2\sigma}^{\beta} n_{2\sigma}^{\gamma} \quad (2.13)$$

$$A_{2\sigma}^{\alpha\beta\gamma} = c_{2\sigma} n_{2\sigma}^{\alpha} n_{1\sigma}^{\beta} n_{1\sigma}^{\gamma}, \quad (2.14)$$

onde

$$n_{i\sigma}^1 = n_{i\sigma} \quad (2.15)$$

$$n_{i\sigma}^2 = 1 - n_{i\sigma}, \quad (2.16)$$

com  $i = 1, 2$ . Estes operadores possuem a propriedade

$$\sum_{\alpha\beta\gamma} A_{i\sigma}^{\alpha\beta\gamma} = c_{i\sigma} \quad (2.17)$$

e obedecem a relação de comutação

$$[A_{i\sigma}^{\alpha\beta\gamma}, H_0] = E_i^{\alpha\beta\gamma} A_{i\sigma}^{\alpha\beta\gamma}, \quad (2.18)$$

onde

$$E_i^{\alpha\beta\gamma} = \epsilon_i + (2 - \alpha)U^i + (4 - \beta - \gamma)U^{(1)(2)}. \quad (2.19)$$

Utilizando a propriedade (2.17) obtemos que, em termos dos operadores  $A_{i\sigma}^{\alpha\beta\gamma}$ , a função de Green para o  $i$ -ésimo PQ pode ser escrita como

$$\begin{aligned} g_{ii\sigma}(\omega) &= \langle\langle c_{i\sigma}; c_{i\sigma}^{\dagger} \rangle\rangle_{\omega} \\ &= \sum_{\alpha\beta\gamma} \langle\langle A_{i\sigma}^{\alpha\beta\gamma}; c_{i\sigma}^{\dagger} \rangle\rangle_{\omega}. \end{aligned} \quad (2.20)$$

O interessante em se escrever a função de Green  $g_{ii\sigma}$  desta maneira é que podemos, com muito mais facilidade, resolver as equações de movimento se, ao invés de  $g_{ii\sigma}$ , escrevermos estas equações para  $\langle\langle A_{i\sigma}^{\alpha\beta\gamma}; c_{i\sigma}^{\dagger} \rangle\rangle_{\omega}$ . De posse da função  $\langle\langle A_{i\sigma}^{\alpha\beta\gamma}; c_{i\sigma}^{\dagger} \rangle\rangle_{\omega}$  podemos adotar dois procedimentos distintos: o primeiro é conhecido como aproximação Hubbard I<sup>18</sup> e consiste em somar esta função em  $\alpha$ ,  $\beta$  e  $\gamma$ , obter a função de Green despida  $g_{ii\sigma}$  e, em seguida,

embeber esta função com o resto do sistema de forma a se encontrar função de Green vestida  $G_{ii\sigma}(\omega)$ . Outro procedimento seria vestir diretamente a função  $\langle\langle A_{i\sigma}^{\alpha\beta\gamma}; c_{i\sigma}^\dagger \rangle\rangle_\omega$  e calcular todas as grandezas autoconsistentes antes de somá-la. A conveniência de cada uma das formas de se proceder irá depender do que se pretende estudar no sistema. O segundo procedimento, conhecido como aproximação Hubbard III<sup>19</sup>, é superior ao primeiro e mais adequado para, por exemplo, estudar as transições metal-isolante para um sistema tridimensional<sup>20,21</sup>. No caso particular deste trabalho vamos trabalhar com a aproximação Hubbard I<sup>18</sup> que tem sido utilizada satisfatoriamente para estudar o bloqueamento de Coulomb e o comportamento não linear que o sistema pode vir a apresentar<sup>12-16</sup>.

### 2.4.1 Funções de Green para os PQ's associados em paralelo

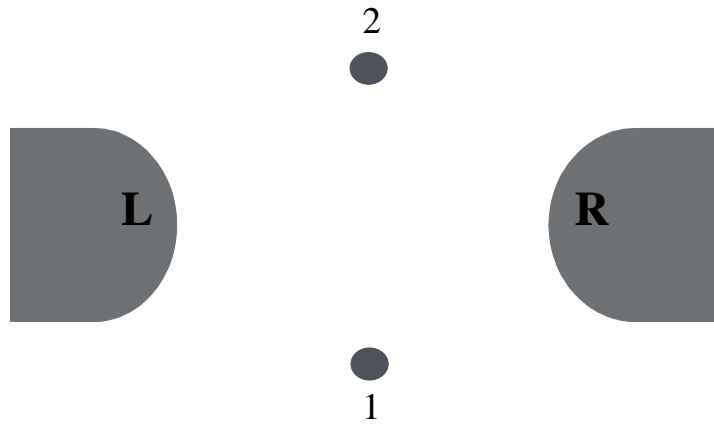


Figura 2.4: Pontos quânticos em paralelo e desconectados dos reservatórios.

Considerando os PQ's 1 e 2 desconectados dos reservatórios e dispostos em paralelo com relação aos mesmos, como mostra a figura (2.4), podemos escrever as equações de movimento

$$\omega g_{11\sigma}^{\alpha\beta\gamma}(\omega) = \frac{1}{2\pi} \langle\langle [A_{1\sigma}^{\alpha\beta\gamma}, c_{1\sigma}^\dagger] \rangle\rangle + \langle\langle [A_{1\sigma}^{\alpha\beta\gamma}, H_0]; c_{1\sigma}^\dagger \rangle\rangle \quad (2.21)$$

$$\omega g_{22\sigma}^{\alpha\beta\gamma}(\omega) = \frac{1}{2\pi} \langle\langle [A_{2\sigma}^{\alpha\beta\gamma}, c_{2\sigma}^\dagger] \rangle\rangle + \langle\langle [A_{2\sigma}^{\alpha\beta\gamma}, H_0]; c_{2\sigma}^\dagger \rangle\rangle, \quad (2.22)$$

onde as funções

$$g_{11\sigma}^{\alpha\beta\gamma}(\omega) = \langle\langle A_{1\sigma}^{\alpha\beta\gamma}; c_{1\sigma}^\dagger \rangle\rangle_\omega \quad (2.23)$$

$$g_{22\sigma}^{\alpha\beta\gamma}(\omega) = \langle\langle A_{2\sigma}^{\alpha\beta\gamma}; c_{2\sigma}^\dagger \rangle\rangle_\omega, \quad (2.24)$$

depois de somadas em  $\alpha$ ,  $\beta$  e  $\gamma$ , fornecem, respectivamente, as funções de Green despidas para os PQ's 1 e 2. Utilizando as relações de comutação

$$[A_{1\sigma}^{\alpha\beta\gamma}, c_{1\sigma}^\dagger] = n_{1\bar{\sigma}}^\alpha n_{2\sigma}^\beta n_{2\bar{\sigma}}^\gamma \quad (2.25)$$

$$[A_{2\sigma}^{\alpha\beta\gamma}, c_{2\sigma}^\dagger] = n_{2\bar{\sigma}}^\alpha n_{1\sigma}^\beta n_{1\bar{\sigma}}^\gamma \quad (2.26)$$

e considerando também a relação (2.16), podemos escrever as equações de movimento (2.21) e (2.22) como,

$$\omega g_{11\sigma}^{\alpha\beta\gamma} = \frac{1}{2\pi} \langle n_{1\bar{\sigma}}^\alpha n_{2\sigma}^\beta n_{2\bar{\sigma}}^\gamma \rangle + E_{1\sigma}^{\alpha\beta\gamma} g_{11\sigma}^{\alpha\beta\gamma}, \quad (2.27)$$

$$\omega g_{22\sigma}^{\alpha\beta\gamma} = \frac{1}{2\pi} \langle n_{2\bar{\sigma}}^\alpha n_{1\sigma}^\beta n_{1\bar{\sigma}}^\gamma \rangle + E_{2\sigma}^{\alpha\beta\gamma} g_{22\sigma}^{\alpha\beta\gamma}, \quad (2.28)$$

de modo a obtermos as funções de Green

$$g_{11\sigma}^{\alpha\beta\gamma}(\omega) = \frac{1}{2\pi} \frac{\langle n_{1\bar{\sigma}}^\alpha n_{2\sigma}^\beta n_{2\bar{\sigma}}^\gamma \rangle}{\omega - E_{1\sigma}^{\alpha\beta\gamma} - i\eta} \quad (2.29)$$

$$g_{22\sigma}^{\alpha\beta\gamma}(\omega) = \frac{1}{2\pi} \frac{\langle n_{2\bar{\sigma}}^\alpha n_{1\sigma}^\beta n_{1\bar{\sigma}}^\gamma \rangle}{\omega - E_{2\sigma}^{\alpha\beta\gamma} - i\eta}, \quad (2.30)$$

que, somadas em  $\alpha$ ,  $\beta$  e  $\gamma$ , correspondem, respectivamente, às funções de Green despidas  $g_{11\sigma}(\omega)$  e  $g_{22\sigma}(\omega)$ . Estas funções de Green, embora despidas em relação ao Hamiltoniano  $H_1$ , que é responsável pelas conexões dos PQ's com o resto do sistema, incluem toda a interação coulombiana local. Considerando a conexão dos PQ's com os reservatórios, como na figura (2.1), podemos renormalizar estas funções e obter em termos de uma expansão diagramática as funções de Green vestidas correspondentes ao sistema completo. De fato, considerando estas funções antes de serem somadas em  $\alpha$ ,  $\beta$  e  $\gamma$  podemos escrever na aproximação Hubbard I<sup>22</sup>

$$G_{11\sigma}^{\alpha\beta\gamma} = g_{11\sigma}^{\alpha\beta\gamma} + g_{11\sigma}^{\alpha\beta\gamma} t_{1L} G_{L1\sigma} + g_{11\sigma}^{\alpha\beta\gamma} t_{1R} G_{R1\sigma} \quad (2.31)$$

$$G_{22\sigma}^{\alpha\beta\gamma} = g_{22\sigma}^{\alpha\beta\gamma} + g_{22\sigma}^{\alpha\beta\gamma} t_{2L} G_{L2\sigma} + g_{22\sigma}^{\alpha\beta\gamma} t_{2R} G_{R2\sigma}, \quad (2.32)$$

onde  $G_{L(R)1(2)}$  descrevem a propagação entre os reservatórios  $L(R)$  e os sítios 1(2). Estas funções, por serem vestidas, incorporam a física de todo o sistema e, por sua vez, podem ser escritas como

$$G_{L1\sigma} = \tilde{g}_L t_{1L} G_{11\sigma} + \tilde{g}_L t_{2L} G_{21\sigma} \quad (2.33)$$

$$G_{R1\sigma} = \tilde{g}_R t_{1R} G_{11\sigma} + \tilde{g}_R t_{2R} G_{21\sigma} \quad (2.34)$$

$$G_{L2\sigma} = \tilde{g}_L t_{2L} G_{22\sigma} + \tilde{g}_L t_{1L} G_{12\sigma} \quad (2.35)$$

$$G_{R2\sigma} = \tilde{g}_R t_{2R} G_{22\sigma} + \tilde{g}_R t_{1R} G_{12\sigma}. \quad (2.36)$$

Voltando com (2.33) e (2.34) em (2.31) e com (2.35) e (2.36) em (2.32) obtemos

$$G_{11\sigma}^{\alpha\beta\gamma} = g_{11\sigma}^{\alpha\beta\gamma} + g_{11\sigma}^{\alpha\beta\gamma} P_{1\sigma} G_{21\sigma} + g_{11\sigma}^{\alpha\beta\gamma} P_{2\sigma} G_{11\sigma} \quad (2.37)$$

$$G_{22\sigma}^{\alpha\beta\gamma} = g_{22\sigma}^{\alpha\beta\gamma} + g_{22\sigma}^{\alpha\beta\gamma} P_{1\sigma} G_{12\sigma} + g_{22\sigma}^{\alpha\beta\gamma} P_{3\sigma} G_{22\sigma}, \quad (2.38)$$

onde definimos os termos

$$P_{1\sigma} = t_{1L} t_{2L} \tilde{g}_L + t_{1R} t_{2R} \tilde{g}_R \quad (2.39)$$

$$P_{2\sigma} = t_{1L}^2 \tilde{g}_L + t_{1R}^2 \tilde{g}_R \quad (2.40)$$

$$P_{3\sigma} = t_{2L}^2 \tilde{g}_L + t_{2R}^2 \tilde{g}_R. \quad (2.41)$$

Somando (2.37) e (2.38) em  $\alpha$ ,  $\beta$  e  $\gamma$  ficamos com

$$G_{11\sigma} = g_{11\sigma} + g_{11\sigma} P_{1\sigma} G_{21\sigma} + g_{11\sigma} P_{2\sigma} G_{11\sigma} \quad (2.42)$$

$$G_{22\sigma} = g_{22\sigma} + g_{22\sigma} P_{1\sigma} G_{12\sigma} + g_{22\sigma} P_{3\sigma} G_{22\sigma}, \quad (2.43)$$

ou, isolando  $G_{11\sigma}$  e  $G_{22\sigma}$ ,

$$G_{11\sigma} = \frac{g_{11\sigma} + P_{1\sigma} g_{11\sigma} G_{21\sigma}}{1 - g_{11\sigma} P_{2\sigma}} \quad (2.44)$$

$$G_{22\sigma} = \frac{g_{22\sigma} + P_{1\sigma} g_{22\sigma} G_{12\sigma}}{1 - g_{22\sigma} P_{3\sigma}}. \quad (2.45)$$

Para os propagadores  $G_{21\sigma}$  e  $G_{12\sigma}$  temos

$$G_{21\sigma} = g_{22\sigma} t_{2L} G_{L1\sigma} + g_{22\sigma} t_{2R} G_{R1\sigma} \quad (2.46)$$

$$G_{12\sigma} = g_{11\sigma} t_{1L} G_{L2\sigma} + g_{11\sigma} t_{1R} G_{R2\sigma}. \quad (2.47)$$

Substituindo (2.33) e (2.34) em (2.46) e (2.35) e (2.36) em (2.47) obtemos

$$G_{21\sigma} = \frac{P_{1\sigma} g_{22\sigma} G_{11\sigma}}{1 - g_{22\sigma} P_{3\sigma}} \quad (2.48)$$

$$G_{12\sigma} = \frac{P_{1\sigma} g_{11\sigma} G_{22\sigma}}{1 - g_{11\sigma} P_{2\sigma}}, \quad (2.49)$$

onde os termos  $P_{1\sigma}$ ,  $P_{2\sigma}$  e  $P_{3\sigma}$  são dados por (2.39), (2.40) e (2.41), respectivamente. Levando estas expressões em (2.44) e em (2.45) obtemos para as funções de Green vestidas  $G_{11\sigma}$  e  $G_{22\sigma}$ ,



$$G_{11\sigma} = \frac{(1 - g_{22\sigma}P_{3\sigma})g_{11\sigma}}{(1 - g_{11\sigma}P_{2\sigma})(1 - g_{22\sigma}P_{3\sigma}) - g_{11\sigma}g_{22\sigma}P_{1\sigma}^2} \quad (2.50)$$

$$G_{22\sigma} = \frac{(1 - g_{11\sigma}P_{2\sigma})g_{22\sigma}}{(1 - g_{11\sigma}P_{2\sigma})(1 - g_{22\sigma}P_{3\sigma}) - g_{11\sigma}g_{22\sigma}P_{1\sigma}^2}. \quad (2.51)$$

Voltando com estas expressões em (2.48) e (2.49) obtemos para os propagadores vestidos  $G_{21\sigma}$  e  $G_{12\sigma}$ ,

$$G_{21\sigma} = G_{12\sigma} = \frac{g_{11\sigma}g_{22\sigma}P_{1\sigma}}{(1 - g_{11\sigma}P_{2\sigma})(1 - g_{22\sigma}P_{3\sigma}) - g_{11\sigma}g_{22\sigma}P_{1\sigma}^2}. \quad (2.52)$$

Substituindo em (2.37) as equações (2.50) e (2.58) e em (2.38) as equações (2.51) e (2.58) obtemos na aproximação Hubbard I

$$G_{11\sigma}^{\alpha\beta\gamma} = \frac{(1 - g_{22\sigma}P_{3\sigma})g_{11\sigma}^{\alpha\beta\gamma}}{(1 - g_{11\sigma}P_{2\sigma})(1 - g_{22\sigma}P_{3\sigma}) - g_{11\sigma}g_{22\sigma}P_{1\sigma}^2} \quad (2.53)$$

$$G_{22\sigma}^{\alpha\beta\gamma} = \frac{(1 - g_{11\sigma}P_{2\sigma})g_{22\sigma}^{\alpha\beta\gamma}}{(1 - g_{11\sigma}P_{2\sigma})(1 - g_{22\sigma}P_{3\sigma}) - g_{11\sigma}g_{22\sigma}P_{1\sigma}^2}, \quad (2.54)$$

que, somadas em  $\alpha$ ,  $\beta$  e  $\gamma$ , correspondem às funções de Green vestidas (2.50) e (2.51). Estas funções englobam toda a informação física do sistema (incluindo os reservatórios) e, como veremos na seção (2.5), nos permite obter a carga eletrônica e a DOS nos PQ's, o que é feito a partir de um cálculo autoconsistente envolvendo a integral da parte imaginária destas funções<sup>17</sup>.

Escrevendo agora os propagadores  $G_{12\sigma}$  e  $G_{21\sigma}$ , antes de serem somados em  $\alpha$ ,  $\beta$  e  $\gamma$ , em termos de uma expansão diagramática,

$$G_{21\sigma}^{\alpha\beta\gamma} = g_{22\sigma}^{\alpha\beta\gamma}t_{2L}G_{L1\sigma} + g_{22\sigma}^{\alpha\beta\gamma}t_{2R}G_{R1\sigma} \quad (2.55)$$

$$G_{12\sigma}^{\alpha\beta\gamma} = g_{11\sigma}^{\alpha\beta\gamma}t_{1L}G_{L2\sigma} + g_{11\sigma}^{\alpha\beta\gamma}t_{1R}G_{R2\sigma}, \quad (2.56)$$

e trabalhando de forma análoga obtemos

$$G_{21\sigma}^{\alpha\beta\gamma} = \frac{g_{11\sigma}g_{22\sigma}^{\alpha\beta\gamma}P_{1\sigma}}{(1 - g_{11\sigma}P_{2\sigma})(1 - g_{22\sigma}P_{3\sigma}) - g_{11\sigma}g_{22\sigma}P_{1\sigma}^2} \quad (2.57)$$

$$G_{12\sigma}^{\alpha\beta\gamma} = \frac{g_{11\sigma}^{\alpha\beta\gamma}g_{22\sigma}P_{1\sigma}}{(1 - g_{11\sigma}P_{2\sigma})(1 - g_{22\sigma}P_{3\sigma}) - g_{11\sigma}g_{22\sigma}P_{1\sigma}^2}, \quad (2.58)$$

que, somados em  $\alpha$ ,  $\beta$  e  $\gamma$ , correspondem aos propagadores  $G_{21\sigma}$  e  $G_{12\sigma}$ , vestidos com a informação física do sistema completo.

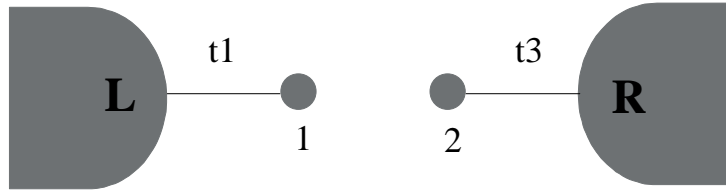


Figura 2.5: Pontos quânticos em série conectados cada qual a um reservatório e desconectados entre si.

### 2.4.2 Funções de Green para os PQ's associados em série

Para esta topologia vamos considerar inicialmente os PQ's 1 e 2 desconectados entre si e conectados, respectivamente, aos reservatórios da esquerda e da direita como mostra a figura (2.5). As funções de Green para estes subsistemas são obtidas pela simples renormalização dos PQ's com seus respectivos reservatórios. Assim, para o subsistema constituído do PQ 1 conectado ao reservatório da esquerda podemos escrever a expansão

$$\begin{aligned} \tilde{g}_{11} &= g_{11} + g_{11}t_1G_{L1} \\ &= g_{11} + g_{11}t_1\tilde{g}_{LL}t_1\tilde{g}_{11}, \end{aligned} \quad (2.59)$$

onde  $g_{11}$  corresponde a função de Green (2.29) obtida na seção anterior e somada para  $\alpha, \beta$  e  $\gamma$ . Isolando  $\tilde{g}_{11}$  nesta expansão obtemos que

$$\tilde{g}_{11} = \frac{g_{11}}{1 - t_1^2\tilde{g}_{LL}g_{11}} \quad (2.60)$$

é a função Green para o subsistema que estamos considerando. De modo análogo obtemos que a função de Green do subsistema constituído do PQ 2 conectado ao reservatório da direita é dada por

$$\tilde{g}_{22} = \frac{g_{22}}{1 - t_3^2\tilde{g}_{RR}g_{22}}, \quad (2.61)$$

onde  $\tilde{g}_{22}$  corresponde a função (2.30) somada em  $\alpha, \beta$  e  $\gamma$ .

Considerando o sistema completo, com os PQ's 1 e 2 conectados entre si através do termo de hopping  $t_2$  e, respectivamente, aos reservatórios da esquerda e da direita a partir de  $t_1$  e  $t_3$ , podemos escrever, no contexto da aproximação Hubbard I,

$$G_{11}^{\alpha\beta\gamma} = g_{11}^{\alpha\beta\gamma} + g_{11}^{\alpha\beta\gamma}t_1G_{L1} + g_{11}^{\alpha\beta\gamma}t_2G_{21}, \quad (2.62)$$

onde

$$G_{L1} = \tilde{g}_L t_1 G_{11} \quad (2.63)$$

$$G_{21} = \tilde{g}_{22} t_2 G_{11}. \quad (2.64)$$

Voltando com (2.63) e (2.64) em (2.62) temos

$$G_{11}^{\alpha\beta\gamma} = g_{11}^{\alpha\beta\gamma} + t_1^2 \tilde{g}_L G_{11} g_{11}^{\alpha\beta\gamma} + t_2^2 \tilde{g}_{22} G_{11} g_{11}^{\alpha\beta\gamma}. \quad (2.65)$$

Utilizando as funções  $\tilde{g}_{11}$  e  $\tilde{g}_{22}$  obtidas acima podemos expandir  $G_{11}$  como

$$\begin{aligned} G_{11} &= \tilde{g}_{11} + \tilde{g}_{11} t_2 G_{21} \\ &= \tilde{g}_{11} + \tilde{g}_{11} t_2 \tilde{g}_{22} t_2 G_{11}, \end{aligned} \quad (2.66)$$

de modo a obtermos

$$G_{11} = \frac{\tilde{g}_{11}}{1 - t_2^2 \tilde{g}_{11} \tilde{g}_{22}}, \quad (2.67)$$

que é a expressão para a função de Green vestida correspondente ao PQ 1. Levando esta expressão em (2.65) e considerando que

$$t_1^2 \tilde{g}_L = \frac{1}{g_{11}} - \frac{1}{\tilde{g}_{11}} \quad (2.68)$$

obtemos

$$G_{11}^{\alpha\beta\gamma} = \frac{g_{11}^{\alpha\beta\gamma}}{g_{11}} \frac{\tilde{g}_{11}}{1 - t_2^2 \tilde{g}_{11} \tilde{g}_{22}}, \quad (2.69)$$

que, somada em  $\alpha$ ,  $\beta$  e  $\gamma$ , corresponde a função de Green vestida  $G_{11}$ . Trabalhando de forma análoga, obtemos

$$G_{22}^{\alpha\beta\gamma} = \frac{g_{22}^{\alpha\beta\gamma}}{g_{22}} \frac{\tilde{g}_{22}}{1 - t_2^2 \tilde{g}_{11} \tilde{g}_{22}}, \quad (2.70)$$

que, somada em  $\alpha$ ,  $\beta$  e  $\gamma$ , corresponde a função de Green vestida

$$G_{22} = \frac{\tilde{g}_{22}}{1 - t_2^2 \tilde{g}_{11} \tilde{g}_{22}}, \quad (2.71)$$

que veste o PQ 2 com toda a informação física do sistema. A exemplo do que fizemos na seção anterior destacamos que, a partir da integral da parte imaginária das funções  $G_{11}$  e  $G_{22}$  podemos calcular de forma autoconsistente a DOS e a carga eletrônica nos PQ's.

Trabalhando agora com os propagadores temos que, para  $G_{12}$ , considerado na aproximação Hubbard I antes de somado em  $\alpha$ ,  $\beta$  e  $\gamma$  temos

$$G_{12}^{\alpha\beta\gamma} = \tilde{g}_{11}^{\alpha\beta\gamma} t_2 G_{22}, \quad (2.72)$$

onde, na mesma aproximação,

$$\tilde{g}_{11}^{\alpha\beta\gamma} = \frac{g_{11}^{\alpha\beta\gamma}}{g_{11}} \tilde{g}_{11}. \quad (2.73)$$

Voltando com (2.73) em (2.72) e considerando que

$$G_{12} = \tilde{g}_{11} t_2 G_{22}, \quad (2.74)$$

obtemos

$$G_{12}^{\alpha\beta\gamma} = \frac{g_{11}^{\alpha\beta\gamma}}{g_{11}} G_{12}. \quad (2.75)$$

De forma análoga obtemos

$$G_{21}^{\alpha\beta\gamma} = \frac{g_{22}^{\alpha\beta\gamma}}{g_{22}} G_{21}, \quad (2.76)$$

onde  $G_{21}$  é dada pela equação (2.64). Estes propagadores correspondem a amplitude de probabilidade associada a propagação de elétrons de um PQ a outro<sup>23</sup> e, como veremos no próximo capítulo, são de grande importância para o tratamento do sistema quando fora do equilíbrio termodinâmico, principalmente no que diz respeito ao cálculo da corrente elétrica que atravessa o sistema.

## 2.5 Determinação autoconsistente da carga eletrônica e densidade de estados em equilíbrio termodinâmico.

Vamos agora, a partir das funções vestidas obtidas na seção anterior, calcular as cargas eletrônicas e as DOS nos PQ's para o sistema com as duas topologias que estamos considerando. Antes, no entanto, vamos explicar o processo autoconsistente para o caso mais simples de um único PQ conectado a dois reservatórios de elétrons em equilíbrio termodinâmico<sup>17</sup>. Neste caso, a carga eletrônica é obtida a partir da função vestida

$$G^\sigma(\omega) = \langle\langle c_\sigma; c_\sigma^\dagger \rangle\rangle. \quad (2.77)$$

De fato a carga do elétron de spin  $\sigma$  no PQ,  $\langle n \rangle$ , é expressa pela integral

$$\langle n_\sigma \rangle = \langle c_\sigma^\dagger c_\sigma \rangle = \int_{-\infty}^{\epsilon_f} \text{Im} G^\sigma(\omega) d\omega, \quad (2.78)$$

onde a parte imaginária da função de Green  $G^\sigma(\omega)$  que aparece no integrando representa a DOS no PQ e  $\epsilon_f$  o nível de Fermi dos reservatórios. A DOS, por sua vez, depende da carga  $n$  no PQ que é, em princípio, o

que deseja-se calcular. Esta dificuldade pode ser contornada calculando-se simultaneamente estas duas grandezas a partir de um método numérico autoconsistente. Uma forma de resolver o problema consiste em atribuir um valor inicial  $n^0$  para a carga, a partir do qual obtem-se um primeiro valor para a DOS que, em seguida, fornece um segundo valor  $n^1$  para a carga. Este valor é utilizado para se obter um segundo valor para a densidade de estados que, por sua vez, fornece um terceiro valor para a carga e assim sucessivamente até que, após  $j + 1$  ciclos, o valor  $n^j$  obtido para a carga seja suficientemente próximo do valor anterior  $n^{j-1}$ , como para considerar o valor  $n^j$  como o valor da carga autoconsistente. No sistema de dois PQ's com que estamos trabalhando, as cargas eletrônicas são interdependentes e durante o processo várias são as grandezas a serem calculadas autoconsistentemente como aparecem nas equações (2.29) e (2.30). Para o caso em que as interações intra e inter PQ's são finitas, oito são as grandezas a serem calculadas desta maneira. A saber:  $\langle n_{1\bar{\sigma}} n_{2\sigma} n_{2\bar{\sigma}} \rangle$ ,  $\langle n_{2\bar{\sigma}} n_{1\sigma} n_{1\bar{\sigma}} \rangle$ ,  $\langle n_{1\sigma} n_{1\bar{\sigma}} \rangle$ ,  $\langle n_{2\sigma} n_{2\bar{\sigma}} \rangle$ ,  $\langle n_{1\sigma} n_{2\sigma} \rangle$ ,  $\langle n_{1\sigma} n_{2\bar{\sigma}} \rangle$ ,  $\langle n_{1\bar{\sigma}} \rangle$  e  $\langle n_{2\bar{\sigma}} \rangle$ . No caso particular em que a interação intra PQ se torna infinita (permanecendo finita a interação inter PQ's) os quatro primeiros destes valores médios vão a zero de modo que ficamos apenas com,  $\langle n_{1\sigma} n_{2\sigma} \rangle$ ,  $\langle n_{1\sigma} n_{2\bar{\sigma}} \rangle$ ,  $\langle n_{1\bar{\sigma}} \rangle$  e  $\langle n_{2\bar{\sigma}} \rangle$ . Caso seja a interação inter PQ's que se torne infinita (permanecendo finita a interação intra PQ's) ficamos com,  $\langle n_{1\sigma} n_{1\bar{\sigma}} \rangle$ ,  $\langle n_{2\sigma} n_{2\bar{\sigma}} \rangle$ ,  $\langle n_{1\bar{\sigma}} \rangle$  e  $\langle n_{2\bar{\sigma}} \rangle$  e, no caso mais restrito em que tanto as interações inter PQ's como as interações intra PQ's são infinitas ficamos apenas com  $\langle n_{1\bar{\sigma}} \rangle$  e  $\langle n_{2\bar{\sigma}} \rangle$ . Considerando a estrutura das funções  $\langle\langle A_{1\sigma}^{\alpha\beta\gamma}; c_{1\sigma}^\dagger \rangle\rangle$  e  $\langle\langle A_{2\sigma}^{\alpha\beta\gamma}; c_{2\sigma}^\dagger \rangle\rangle$  podemos escrever as integrais

$$N_{1\sigma}^{\alpha\beta\gamma} = \langle n_{1\sigma} n_{1\bar{\sigma}}^\alpha n_{2\sigma}^\beta n_{2\bar{\sigma}}^\gamma \rangle = \int_{-\infty}^{\epsilon_f} \text{Im} G_{11\sigma}^{\alpha\beta\gamma}(\omega) d\omega \quad (2.79)$$

e

$$N_{2\sigma}^{\alpha\beta\gamma} = \langle n_{2\sigma} n_{2\bar{\sigma}}^\alpha n_{1\sigma}^\beta n_{1\bar{\sigma}}^\gamma \rangle = \int_{-\infty}^{\epsilon_f} \text{Im} G_{22\sigma}^{\alpha\beta\gamma}(\omega) d\omega, \quad (2.80)$$

a partir das quais podemos calcular autoconsistentemente todos os valores médios referidos acima e, em consequência, obter os resultados para as cargas eletrônicas e para as DOS nos PQ's.