

6

Conclusão

Nesta tese estudamos o transporte eletrônico através de estruturas nanoscópicas constituídas de pontos quânticos acoplados a reservatórios no regime de interação forte e no equilíbrio termodinâmico. No capítulo 2 discutimos o modelo de Anderson utilizado para descrever a interação EE. Discutimos o bloqueamento de Coulomb e o efeito Kondo com a utilização do método das equações de movimento para as funções de Green.

No capítulo 3 tratamos do problema da interação EF numa molécula diatômica, constituída de dois sítios atômicos interagentes. O estudo do transporte eletrônico através do sistema revelou que no regime onde ambas as interações EE e EF são importantes as condições de ressonância para os processos envolvendo fônons diferem das que foram encontradas por Tasai e Eto em [63] para problema de um ponto quântico de dois níveis. Essas novas condições de ressonância levam em conta a energia necessária para que os elétrons vençam a energia da repulsão Coulombiana. Esse é a manifestação do fenômeno do bloqueamento de Coulomb nos processos envolvendo emissão e absorção de fônons. Mostramos que quando o sistema se encontra nessas condições de ressonâncias, os níveis de energia são desdobrados, um fenômeno conhecido como desdobramento de Rabi, neste caso mediado por fônons. Esse desdobramento é refletido na densidade de estados da molécula. Quando os estados originais encontram-se ressonantes com o nível de Fermi, o desdobramento de Rabi produz uma redução de estados em torno do nível de Fermi. Esse decréscimo na densidade de estados no nível de Fermi produz uma supressão na condutância do sistema, por haver menos estados disponíveis através dos quais os elétrons possam atravessar o sistema. As condições para tunelamento ressonante são satisfeitas quando esses novos picos resultantes do desdobramento de Rabi se encontram alinhados com o nível de Fermi. Esse efeito, que denominamos de *tunelamento ressonante assistido por Rabi*, foram reportados nas referências [4] e [97]. Esses resultados nos permitem entender um pouco melhor os efeitos das vibrações moleculares no fluxo de elétrons através de cadeias de átomos[56].

No capítulo 4 estudamos o transporte eletrônico num sistema de dois

PQ's associados em série e em paralelo e acoplados a dois reservatórios eletrônicos, no regime Kondo, utilizando o método dos bósons escravos na aproximação de campo médio. Discutimos as duas formulações desse método, no regime de U infinito e U finito. Para a formulação em U infinito discutimos a aproximação de campo médio no contexto de uma única impureza e propusemos uma forma de ir além dessa aproximação, considerando a dinâmica dos bósons escravos nas equações de movimento para as funções de Green. Comparando as funções de Green obtidas com essa abordagem com as obtidas com os operadores de Hubbard mostramos que levar em conta as flutuações dos bósons escravos com as equações de movimento equivale a abordar o problema com as equações de movimento para as funções de Green puramente fermiônicas.

No caso de dois PQ's utilizamos a formulação para U finito. Para o acoplamento em série comparamos os resultados obtidos com esse método com os resultados do métodos do aglomerado embebido. Mostramos que perto do regime de simetria elétron-buraco os resultados desses dois métodos estão em bastante acordo. No entanto longe desse regime os resultados diferem. Isso resulta das flutuações que não são levadas em conta quando fazemos aproximação de campo médio para os bósons escravos. Estudamos ainda o efeito da degenerescência nos níveis localizados, mostramos que há uma supressão da condutância à medida que aumenta a diferença de energia entre os níveis dos pontos quânticos. Essa supressão ocorre como resultado da destruição da ressonância Kondo, à medida que os níveis se deslocam para além do ponto de simetria elétron-buraco. No caso do acoplamento em paralelo, estudamos particularmente o efeito do acoplamento cinético direto entre os PQ's. Mostramos que nessa configuração, o aumento desse acoplamento produz uma supressão na condutância do sistema, modificando a estrutura de platô na condutância em função do potencial de porta. Analizando os resultados em termos dos estados simétricos e antissimétricos do sistema, observamos que os platôs remanescentes surgem da contribuição dos estados simétricos, no entanto o estado que parece estar "em Kondo" é o estado antissimétrico. Notamos portanto que, embora o estado antissimétrico não esteja diretamente acoplado aos reservatórios, ele é "enxergado" por intermédio dos estados simétricos.

No capítulo 5 foi analisado um PQ com dois níveis, acoplado a um reservatório, no regime Kondo. Supondo algumas aproximações de modo a simplificar o problema estudamos o efeito das interações EF na densidade de estados do PQ. Os resultados mostraram que sob certas condições de potencial de porta o desdobramento de Rabi produz um estado de muitos corpos cuja

carga líquida é não inteira, cujo spin está acoplado aos spins dos elétrons de condução, produzindo um efeito Kondo de carga não-inteira. Embora os resultados apresentados nessa tese, com relação a esse efeito, são bastante preliminares, o estudo da densidade de estados do sistemas nos permite prever que esse novo efeito terá um papel importante na condutância do sistema.

Em suma, os problemas abordados nessa tese são atuais e de grande interesse na comunidade científica. Acreditamos, portanto, que os resultados dos estudos apresentados possam contribuir para um melhor entendimento do transporte eletrônico em sistemas moleculares artificiais e estimule novos estudos teóricos e experimentais.

6.1

Possíveis avanços

Como possíveis avanços propomos:

- A aplicação dos métodos de cálculos e conceitos desenvolvidos para o estudo do transporte eletrônico em moléculas mais complexas.
- Estudar a situação em que os sistemas são colocados fora do equilíbrio termodinâmico, quando elétrons são injetados no sistema pela aplicação de uma diferença de potencial entre os reservatórios. Para isso, no contexto das funções de Green, é necessária a utilização do formalismo de Keldysh. Nesse formalismo as equações de movimento podem ser aplicadas a fim de encontrar as funções de Green do sistema. No caso de sistemas interagentes, especialmente na presença de interação EF, como no caso estudado no capítulo 3, é interessante estudar a corrente através do sistema, já que fora do equilíbrio pode existir uma contribuição inelástica dos fônons à condutância do sistema.
- Estudar o efeito Kondo de carga não inteira, discutido no capítulo 5, com outros métodos, a fim de ganhar mais entendimento sobre o fenômeno. Acreditamos que o método do aglomerado embebido pode ser conveniente no estudo desse efeito. Esse método poderá ser aplicado ao estudo da condutância desse novo regime e que deverá mostrar um novo canal para os elétrons se deslocarem.