



CBPF

**Centro Brasileiro de
Pesquisas Físicas**

Rua Dr. Xavier Sigaud, 150 Rio de Janeiro, Brasil
Tel:(0xx21) 2141-7100 Fax:(0xx21) 2141-7400 CEP:22290-180

Fernanda Deus da Silva

**Transporte em Ponto Quântico no Regime de Bloqueio
de Coulomb**

Rio de Janeiro
2011

Fernanda Deus da Silva

**Transporte em Ponto Quântico no Regime de Bloqueio
de Coulomb**

Dissertação apresentada ao programa de Pós-graduação em Física do Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas, como requisito para obtenção do título de Mestre em Física.

Orientador:
Prof. Dr. Mucio Amado Continentino

Rio de Janeiro
2011

Agradecimento

Agradeço aos meus pais, Ana Lucia e Gilson, pelo carinho e apoio incondicional em todos os momentos da minha vida, sem vocês nada disso seria possível.

Agradeço também a toda minha família pelo incentivo, mesmo não contribuindo diretamente para esse trabalho, fazem parte dele.

Agradeço ao Fillipe, menino muito especial que durante o processo dessa dissertação me emprestou os ouvidos e muitas vezes o ombro. Entendeu os momentos de ausência e me ajudou muito.

Agradeço ao meu orientador, Prof. Dr. Mucio Amado Continentino, pela oportunidade do trabalho, por estar sempre aberto a discussões e pelo apoio.

Agradeço também ao Prof. Dr. Alexis Ricardo Hernández Nuñez que foi peça fundamental pelo desenvolvimento acelerado dessa dissertação. Sua ajuda foi valorosa.

Agradeço a todos os meus amigos! Muitos deles compartilham do mesmo processo e me ajudaram diversas vezes. Por falta de espaço e por medo de ser traída por minha memória, não posso citar um a um. Mas, a todos vocês que sabem que foram importantes, muito obrigada!

Resumo

Nesse trabalho estudamos transporte dependente do tempo em um ponto quântico com interação. Um ponto quântico é um sistema nano-estruturado zero-dimensional que possui os estados eletrônicos quantizados. No nosso estudo, estamos interessados em estudar tal sistema no regime de bloqueio de Coulomb onde um tratamento do campo médio para as correlações é apropriado. O ponto quântico é descrito por um Hamiltoniano tipo Anderson onde o termo de hibridização surge pelos contatos com os reservatórios.

Nós consideramos a dependência temporal nos termos de energia dos estados localizados e na hibridização. Esses parâmetros dependentes do tempo, sob algumas condições, induzem uma corrente no ponto quântico mesmo na ausência de uma diferença de potencial químico nos reservatórios.

A abordagem desse problema de não-equilíbrio requer o uso do formalismo de Keldysh. Nós calculamos as funções de Green de não-equilíbrio e obtemos os resultados para os valores médio (termo de equilíbrio) e o de não-equilíbrio do número de ocupação eletrônica do ponto. Nós consideramos a possibilidade de soluções magnéticas, com valores diferentes para as médias de spins “up” e “down” no ponto quântico. Nossos resultados nos permite obter, por exemplo, a corrente dependente do tempo que passa através do ponto. A natureza *magnética* do ponto, para um conjunto de parâmetros, deve dar origem também a uma corrente induzida de spin que passa através do ponto.

Abstract

In this work we study the time dependent transport in interacting quantum dots. This is a zero-dimensional nanostructure system which has quantized electronic states. We are interested in studying such system in the Coulomb blockade regime where a mean-field treatment of the electronic correlations is appropriate. The quantum dot is described by an Anderson Hamiltonian where the hybridization term arises from the contact with the leads.

We consider a time dependence of both the energy of the localized state in the quantum dot and of the hybridization-like term. These time dependent parameters, under certain conditions, induce a current in the quantum dot even in the absence of a difference on the chemical potential of the leads.

The approach to this non-equilibrium problem requires the use of a Keldysh formalism. We calculate the non-equilibrium Green's functions and obtain results for the average (equilibrium term) and the non-equilibrium values of the mean electronic occupation numbers in the dot. We consider the possibility of a magnetic solution, with different values for the average up and down spins in the quantum dot. Our results allow to obtain, for instance, the time dependent current through the dot. The *magnetic* nature of the dot, for a certain range of parameters, should give rise also to an induced spin current through the dot.

Conteúdo

Agradecimento	i
Resumo	ii
Abstract	iii
1 Introdução	1
1.1 Ponto Quântico	2
1.2 Transporte Quântico	4
2 Formalismo de Keldysh	8
2.1 Formulação do Problema	8
2.2 Função de Green Ordenada no Contorno	10
2.3 Outras Funções de Green	12
2.4 Continuação Analítica (Teorema de Langreth)	13
3 Bombeamento Quântico de Elétrons	17
3.1 Modelo	17
3.2 Corrente de Bombeamento	19
3.3 Função de Green do Ponto Quântico	20
3.3.1 Aproximação de Campo Médio	25
3.4 Regime Adiabático	27
3.4.1 Reparametrização das Funções de Green	27
3.4.2 Função de Green de Ordem Zero	36
3.4.3 Função de Green de Primeira Ordem	39
4 Resultados	47
4.1 Ordem Zero	47
4.2 Primeira Ordem	52
5 Conclusões e Perspectivas	59

Lista de Figuras

1.1	Ponto quântico - A esquerda temos uma figura esquemática de um ponto quântico. E a direita temos a imagem real feita por microscopia eletrônica.	2
1.2	Figura esquemática de um ponto quântico acoplado a eletrodos.	3
1.3	A assinatura do efeito Kondo devido a um spin no ponto. (a) Condutância linear - comportamento não-usual nos vales ímpares devido ao efeito Kondo - <i>versus</i> a voltagem de porta. (b) Condutância em função da temperatura. (c) Os dados de (b) escalados em uma curva universal, sendo a curva condutância <i>versus</i> temperatura do sistema dividido pela temperatura de Kondo.	4
1.4	Figura esquemática ilustrando o processo de co-tunelamento.	5
1.5	Figura do perfil do potencial de um ponto quântico acoplado a terminais com potenciais químicos μ_R e μ_L no regime de bloqueio de Coulomb.	6
1.6	Perfil da Condutância <i>versus</i> a Energia de Fermi para um sistema de dois níveis no regime de Bloqueio de Coulomb.	7
2.1	Contorno do tempo utilizado na Função de Green Ordenado no Contorno.	11
2.2	Contorno deformado para se obter a continuação analítica.	14
3.1	Figura esquemática do bombeamento de elétrons em um ponto quântico com única ressonância. $V_1(t)$ e $V_2(t)$ produzem variação temporal nos acoplamentos e $V_3(t)$ introduz variação na ressonância.	18
4.1	Função de Fermi-Dirac quando $T = 0K$	48
4.2	Diagrama mostrando as regiões de comportamento magnético e não-magnético previstas pelo modelo Anderson <i>versus</i> Temperatura Kondo para $\frac{-\epsilon_s}{U} = 0.9$	50

4.3	Curva do número médio de ocupação <i>versus</i> $\frac{E}{U} = \frac{\epsilon_s}{U}$, para quatro valores de $\frac{U}{\Delta} = \frac{U}{\Gamma_\alpha}$ distintos. (a) $\frac{U}{\Gamma_\alpha} = 3$. (b) $\frac{U}{\Gamma_\alpha} = 4$. (c) $\frac{U}{\Gamma_\alpha} = 5$. (d) $\frac{U}{\Gamma_\alpha} = 6$	51
4.4	Curva do número médio de ocupação <i>versus</i> $\Omega\bar{t}$	52
4.5	Correções de primeira ordem para o número médio de ocupação do ponto quântico. $\frac{\epsilon_0}{U} = -0.5$, $\frac{\epsilon_1}{U} = 0.05$, $\frac{U}{\Gamma_{0,\alpha}} = 3$, $\frac{\Delta\Gamma}{U} = 0.05$, $\phi_L = -0\phi_R = \pi/2$, $\langle n^{(0)} \rangle = 0.5$	57

Capítulo 1

Introdução

Muito se estudou a respeito do mundo quântico em sistemas físicos, mas a partir do desenvolvimento dos sistemas semicondutores nanoscópicos novas dimensões de pesquisas, no que consiste a física fundamental, se abriram. Foi em um sistema desse tipo que A. Ekimov *et al.*[1] constataram a possibilidade de aprisionar um elétron em um ponto [2]. Devido a complexidade deste sistema, somente depois de alguns anos foi possível compreender os mecanismos físicos que estavam atuando.

Com a confirmação do aprisionamento de elétrons, abriu-se inúmeras possibilidades de exploração desse tema. Das muitas opções, o estudo do transporte eletrônico é uma das principais formas de explorar este problema [3, 4, 5, 6]. No trabalho que segue nos dedicamos em estudar o transporte eletrônico em um ponto quântico.

Nesse capítulo introdutório falamos em mais detalhes sobre as características principais de um ponto quântico. Também caracterizamos o regime de bloqueio de Coulomb.

No capítulo 2 introduzimos o Formalismo do Keldysh, também conhecido como Formalismo da Função de Green de Não-Equilíbrio (NEGF). Tal formalismo é fundamental para o estudo de transporte eletrônico dependente do tempo. Esse capítulo serve para nos familiarizarmos com o formalismo, pois ele é de vital importância para o desenvolvimento do capítulo seguinte.

No capítulo 3 apresentamos o sistema teórico a ser estudado (Hamiltoniano) e utilizamos as ferramentas apresentadas no capítulo anterior para desenvolver uma abordagem teórica para o estudo de bombeamento adiabático em pontos quânticos no regime de bloqueio de Coulomb.

Por fim, no capítulo 4, com as equações encontradas no capítulo anterior e usando parâmetros típicos do sistema, encontramos alguns resultados numéricos.

1.1 Ponto Quântico

O objetivo dessa seção é apresentar as características principais de um ponto quântico, que são sistemas nano-estruturadas zero-dimensionais com os estados eletrônicos completamente quantizados. As três direções espaciais possuem confinamento no movimento, resultando em níveis discretos no espectro de energia semelhantes ao de um átomo, entretanto com uma vantagem, esses níveis são ajustáveis no laboratório.

Esses sistemas são muito influenciados pelas suas dimensões, um ponto quântico pode ser tão pequeno que a introdução de um único elétron é suficiente para produzir mudanças significativas nas propriedades de transporte. Esses elétrons são introduzidos sob condições em que o ponto quântico está isolado de sua vizinhança, de forma que somente o tunelamento entre o ponto e os terminais é permitido, e de tal forma o fenômeno de um único elétron tunelando pode ser observado.

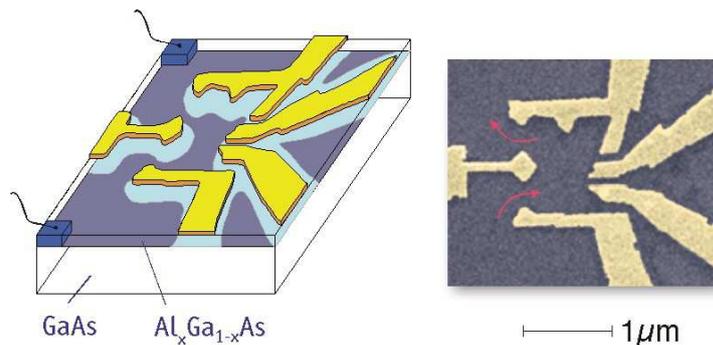


Figura 1.1: Ponto quântico - A esquerda temos uma figura esquemática de um ponto quântico. E a direita temos a imagem real feita por microscopia eletrônica.

De maneira geral, podemos ter dois tipos distintos de pontos quânticos: o ponto quântico produzido em um metal ou em um semiconductor. A principal diferença entre os dois tipos está no número típico de elétrons armazenados no ponto, e em que medida o confinamento quântico influencia nos estados permitidos para os elétrons. Nesse trabalho estamos interessados em estudar os pontos quânticos em semicondutores e por isso, a partir de agora, nos restringiremos a falar somente nesse tipo de ponto quântico.

Um ponto quântico pode ser entendido pensando no problema quântico de tunelamento através de uma ou duas barreiras [7]. Esse tipo de problema era considerado puramente acadêmico, entretanto com o avanço das técnicas de miniaturização de dispositivos, atualmente, existem diversas maneiras de se

produzir um ponto quântico no laboratório. Por exemplo, através de técnicas litográficas é possível depositar eletrodos metálicos sobre uma superfície semicondutora sob a qual reside um gás de elétrons bidimensional¹. Aplica-se tensões negativas nesses contatos suprimindo o gás de elétrons, deixando, assim, uma região vazia de portadores que corresponde ao ponto quântico [8]. A figura (1.1) mostra um ponto quântico produzido pelo grupo de Marcus, em Harvard.

De maneira esquemática, podemos representar uma geometria de transporte elétrico em pontos quânticos como a mostrada na figura (1.2). Temos uma fonte de elétrons a esquerda do ponto (terminal emissor) e um terminal coletor a direita, ou, dependendo do sinal da tensão V , pode ser o contrário. Os terminais estão acoplados com o ponto quântico através de barreiras de tunelamento. As dimensões e energia eletrostática do ponto quântico podem ser ajustadas aplicando-se uma tensão de porta V_g através de um terceiro terminal que não participa diretamente da transferência de carga. Durante todo o nosso trabalho tentaremos explicar o transporte elétrico mediante técnicas de transporte quântico.

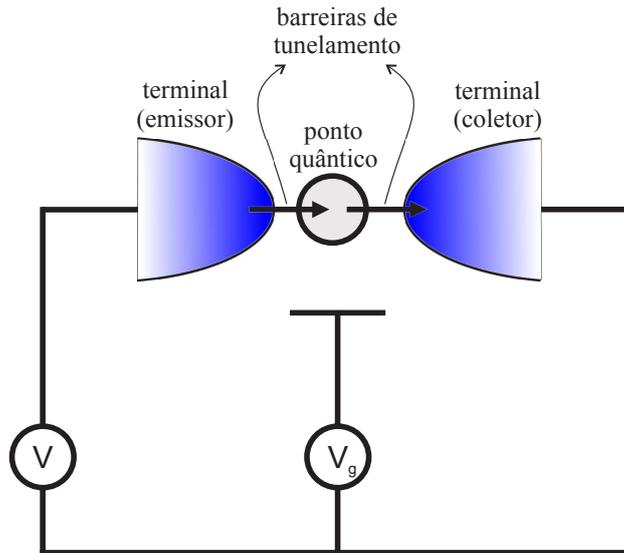


Figura 1.2: Figura esquemática de um ponto quântico acoplado a eletrodos.

¹Um exemplo do desse gás bidimensional reside na interface entre as camadas de GaAs e AlGaAs de um heteroestrutura.

1.2 Transporte Quântico

Existem, basicamente, dois formalismos disponíveis para estudar transporte quântico: o formalismo de Landauer [9, 10] e o formalismo de Keldysh [11, 12]. Nesse trabalho escolhemos o formalismo de Keldysh ou formalismo das funções de Green de não-equilíbrio. A vantagem desse formalismo está na possibilidade de incluir interações de muitos corpos, como por exemplo elétron-elétron e elétron-fônon. Esse formalismo foi desenvolvido em 1965 e desde então vem sendo utilizado para estudar transporte através de pontos quânticos em diversos regimes. Nessa seção discutiremos a respeito de dois regimes, em especial, o regime de Kondo e o regime de bloqueio de Coulomb.

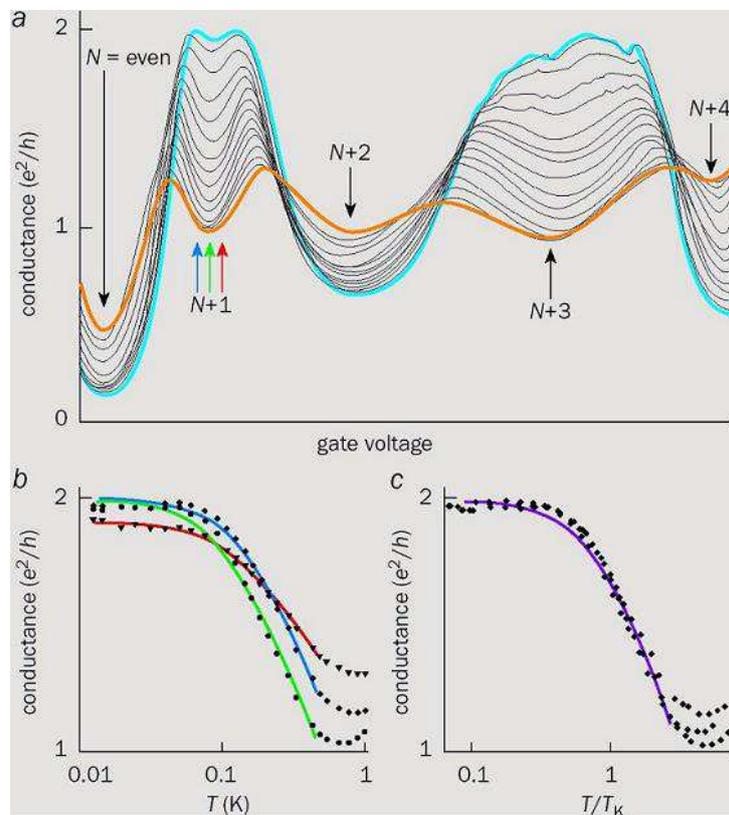


Figura 1.3: A assinatura do efeito Kondo devido a um spin no ponto. (a) Condutância linear - comportamento não-usual nos vales ímpares devido ao efeito Kondo - *versus* a voltagem de porta. (b) Condutância em função da temperatura. (c) Os dados de (b) escalados em uma curva universal, sendo a curva condutância *versus* temperatura do sistema dividido pela temperatura de Kondo.

O efeito Kondo foi originalmente estudado em ligas metálicas diluídas [13] e foi para esse tipo de sistema que o trabalho de Kondo [14] foi desenvolvido. Somente depois dos trabalhos de Glazaman e Raikh [15] e Ng e Lee [16] foi previsto que o comportamento Kondo deveria aparecer em pontos quânticos. A primeira verificação experimental dessa previsão foi conseguida por Goldhaber e Gordon *et al.* [17, 18]. Entretanto, o efeito Kondo em ligas metálicas diluídas possui características diferentes do efeito Kondo em pontos quânticos [19]. Nas ligas metálicas a assinatura do efeito Kondo nas propriedades de transporte é a presença de um mínimo na resistividade elétrica em função da temperatura.

Já a assinatura característica do efeito Kondo em pontos quânticos é o aumento da condutividade com a diminuição da temperatura nos vales ímpares de elétrons enquanto nos vales pares, conforme diminuimos a temperatura, notamos uma diminuição na condutância. Esse comportamento pode ser observado através do resultado de van der Wiel *et al.* [20], na figura (1.3).

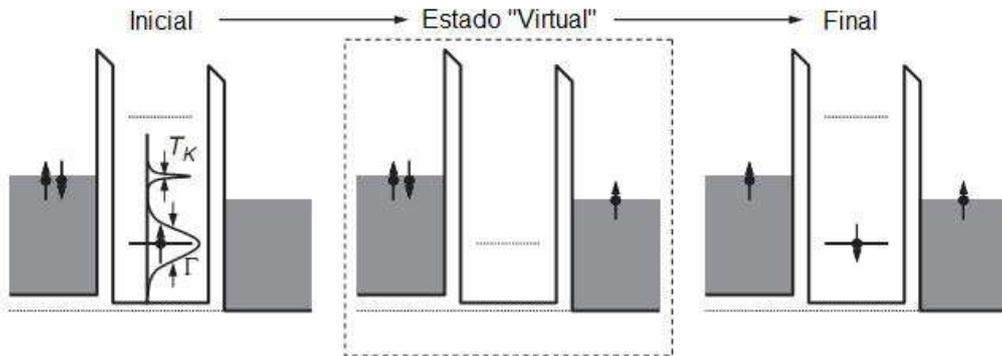


Figura 1.4: Figura esquemática ilustrando o processo de co-tunelamento.

Para entender a origem do efeito Kondo em pontos quânticos observe a figura (1.4) [19]. O estado inicial corresponde a uma situação onde a voltagem é insuficiente para vencer a energia necessária para colocar um elétron adicional no ponto, assim esperaríamos que a condutância exibisse um mínimo. Entretanto, para o caso considerado na figura indicada, o último nível de energia preenchido é ocupado por apenas um spin; nessa situação, devido a alta transmissividade da barreira, ocorre um processo chamado de co-tunelamento. Nesse processo o elétron do ponto quântico tunela para o reservatório da direita, deixando momentaneamente o estado de energia desocupado. Como esse estado dentro do ponto está desocupado, um elétron

pode tunelar substituindo o elétron que faltava. Em primeira análise parece que o estado inicial foi restaurado, mas, note que o spin do elétron no ponto é oposto ao spin do elétron no estado inicial. Observe também que esse processo de co-tunelamento aumenta a transmissão através do ponto, assim a condutância aumenta conforme o efeito Kondo fica mais importante.

Note que o processo de co-tunelamento de fato só é possível nos vales ímpares de elétrons pois é necessário que o último nível de energia seja ocupado por somente um spin. Isso explica porque só observamos o aumento na condutividade, característico do efeito Kondo, para os vales ímpares.

Associado a um ponto quântico, existe uma temperatura característica chamada de temperatura Kondo [21]

$$T_K \sim U \left(\frac{\Gamma}{2U} \right) \exp \left[-\pi |\epsilon_s| \left(\frac{\epsilon_s + U}{2U\Gamma} \right) \right], \quad (1.1)$$

onde, ϵ_s é o nível de energia do elétron no ponto quântico, U é a interação coulombiana entre os elétrons e o ponto e Γ é o acoplamento entre o ponto e os fios. Assim, quando $T \ll T_K$, estamos em um regime onde o efeito Kondo deve ser considerado. No outro extremo, $T \gg T_K$, o efeito Kondo não é significativo, entretanto, temos um outro efeito importante, o efeito de bloqueio de Coulomb [22].

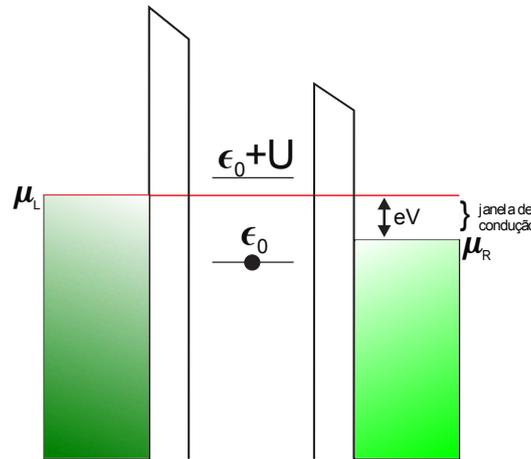


Figura 1.5: Figura do perfil do potencial de um ponto quântico acoplado a terminais com potenciais químicos μ_R e μ_L no regime de bloqueio de Coulomb.

Esse efeito é particularmente importante para esta dissertação pois é nele que vamos trabalhar. O efeito de bloqueio de Coulomb caracteriza-se através

de dois picos na condutividade. A origem do efeito vem de quando, já tendo um elétron dentro do ponto, um outro elétron entra, ocorrendo um acréscimo de U na energia eletrostática do sistema. Se U exceder a energia de Fermi do terminal emissor e a energia térmica $k_B T$, um segundo elétron será impedido, ou bloqueado, de tunelar para dentro do ponto quântico. A figura (1.5) ilustra esquematicamente o perfil do potencial de um ponto quântico acoplado a terminais no regime de bloqueio de Coulomb. Temos que μ_L e μ_R são os potenciais químicos da esquerda e da direita, respectivamente, ϵ_0 é o nível de energia do ponto quântico e U é a energia de adição de um segundo elétron. Na configuração ilustrada, muito embora haja uma tensão externa aplicada, não existirá corrente fluindo pelo sistema, visto que a energia de adição é maior de que μ_L . Variando uma tensão de porta V_g pode-se deslocar o canal $\epsilon_0 + U$ para dentro da janela de condução do sistema, resultando assim em uma corrente não-nula. Caso contrário, um outro elétron é impedido de entrar no ponto. Essa possibilidade de mover os níveis de energia para dentro da janela de condução que causa os picos na condutividade anteriormente mencionados. Observe a figura (1.6) [23], ela representa o perfil da condutância de um ponto quântico no regime de bloqueio de Coulomb.

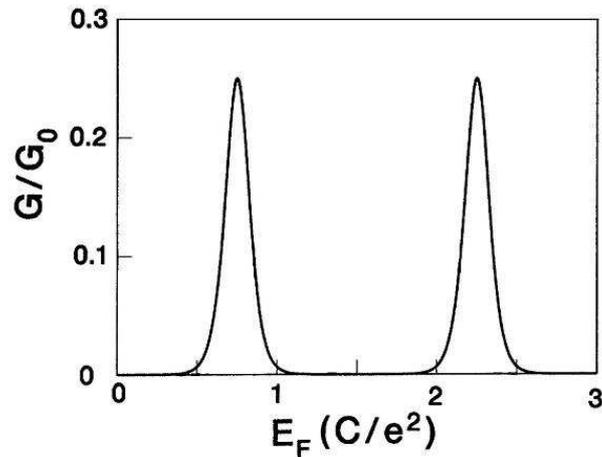


Figura 1.6: Perfil da Condutância *versus* a Energia de Fermi para um sistema de dois níveis no regime de Bloqueio de Coulomb.

Uma vez que caracterizamos o sistema e o regime que vamos estudar, estamos aptos a prosseguir o trabalho.

Capítulo 2

Formalismo de Keldysh

Nesse capítulo introduziremos um formalismo muito útil para se estudar problemas de transporte quântico. Esse tipo de problema, e mesmo o problema clássico de transporte, consiste no cálculo dos efeitos induzidos por um campo externo. Esses efeitos podem ser, por exemplo, a corrente de portadores de carga, a corrente de tunelamento e o seu ruído (shot-noise) em sistemas de pontos quânticos [24], poços quânticos [25], na presença de uma tensão externa, entre outros problemas.

O formalismo de Keldysh, muito conhecido também por formalismo de função de Green de não-equilíbrio (NEGF), foi originalmente proposto por L. V. Keldysh [11] e independentemente por L. Kadanoff e G. Baym [12] em 1965. Desde esses trabalhos originais, esse formalismo vem sendo cada vez mais aplicado em sistemas fora de equilíbrio [26]. Atualmente, principalmente pelos avanços nas técnicas de sintetização de materiais de baixa dimensionalidade, o formalismo de Keldysh é uma das principais técnicas para se estudar transporte quântico em sistemas com interação [27], por exemplo, pontos quânticos [28, 29].

No decorrer deste capítulo descreveremos noções básicas sobre as funções de Green de não-equilíbrio, que serão aplicadas no decorrer do nosso trabalho.

2.1 Formulação do Problema

Formulamos o problema quântico de não-equilíbrio considerando um Hamiltoniano do tipo

$$H = h + H'(t), \tag{2.1}$$

onde o termo h é o Hamiltoniano do sistema independente do tempo, podemos escrevê-lo da seguinte forma

$$h = \sum_i h_0^i + W, \quad (2.2)$$

onde o termo $\sum_i h_0^i$ contém informações sobre os termos de partícula livre do sistema e o termo W diz respeito as interações de muitos corpos. O segundo termo do lado direito da equação (2.1), $H'(t)$, é o responsável por tirar o sistema do equilíbrio, podendo representar um campo elétrico, uma excitação por luz, um acoplamento entre contatos com diferentes potenciais químicos, etc.

Assumimos que em um tempo $t = t_0$ aparece o termo $H'(t)$, em linguagem de teoria de perturbação, podemos dizer que “ligamos” a perturbação $H'(t)$ em $t = t_0$. Portanto, para tempos t menores que t_0 temos que

$$H'(t) = 0, \text{ para } t < t_0, \quad (2.3)$$

e o Hamiltoniano total do sistema é simplesmente $H = h$. É importante observar que para evitar transições entre estados de muitos corpos não-perturbados é necessário que a perturbação seja ligada adiabaticamente [30].

Durante o tempo de validade da equação (2.3) podemos dizer que o sistema está em equilíbrio térmico, a uma temperatura θ , onde é interessante escrever

$$\beta = \frac{1}{k_B \theta}, \quad (2.4)$$

pois utilizaremos isso em nosso trabalho. Podemos, então, escrever a matriz densidade de equilíbrio

$$\rho_0 = \frac{\exp^{-\beta h}}{\text{Tr}(\exp^{-\beta h})}, \quad (2.5)$$

onde o símbolo Tr denota o traço, ou seja, soma sobre alguma base completa de estados:

$$\text{Tr} \equiv \sum_i \langle i, t_0 | \dots | i, t_0 \rangle. \quad (2.6)$$

Dada a matriz densidade, podemos escrever o valor esperado de um observável físico \hat{O} . O valor esperado, $\langle \hat{O} \rangle$, é simplesmente o traço desse operador na representação de Schrödinger multiplicado pela matriz densidade de equilíbrio,

$$\langle \hat{O} \rangle = \text{Tr}\{\rho_0 \hat{O}\}. \quad (2.7)$$

Com o formalismo de Keldysh temos como tarefa principal calcular o valor esperado do operador \hat{O} em tempos $t > t_0$, ou seja, quando $H'(t) \neq 0$. Usaremos a proposta de Kadanoff e Baym em seu trabalho pioneiro de função de Green de não-equilíbrio [12] para calcular essas médias. Define-se a média de não equilíbrio da seguinte forma

$$\langle \hat{O}(t) \rangle = Tr\{\rho_0 \hat{O}_H\}, \quad (2.8)$$

onde \hat{O}_H é o operador \hat{O} escrito na representação de Heisenberg:

$$\hat{O}_H(t) = U^\dagger(t) \hat{O}_S U(t), \quad (2.9)$$

onde \hat{O}_S é o operador \hat{O} na representação de Schrödinger e $U^{(\dagger)}(t)$ é o operador de evolução temporal:

$$U(t) = \exp^{-\frac{i}{\hbar} H(t)}.$$

E como todo operador escrito na representação de Heisenberg, \hat{O}_H evolui segundo a equação de evolução temporal dos operadores de Heisenberg:

$$\frac{d\hat{O}_H(t)}{dt} = i[H, \hat{O}_H(t)]. \quad (2.10)$$

Observe que utilizamos a matriz densidade de equilíbrio para calcular a média de um operador de não equilíbrio; fisicamente podemos argumentar sobre isso dizendo que, como a evolução acontece adiabaticamente, os graus de liberdade termodinâmicos contidos em \hbar não seguem instantaneamente a variação contida em $H'(t)$ [31].

Durante esse trabalho precisaremos calcular valores médios de produto de operadores em diferentes tempos: $\langle \hat{O}(t) \hat{O}'(t') \rangle$, para isso usamos as funções de Green de não-equilíbrio conforme discutiremos adiante.

2.2 Função de Green Ordenada no Contorno

Nessa seção vamos tratar de definir um função muito importante para o formalismo de função de Green de não-equilíbrio: a função de Green ordenada no contorno. Sempre com o formalismo de função de Green de equilíbrio em mente ¹, lembramos que definimos uma função chamada função de Green causal da seguinte forma:

$$G^t(t_1, t'_1) = -i \langle T \psi_H(t_1) \psi_H^\dagger(t'_1) \rangle,$$

¹Uma discussão mais detalhada desse formalismo pode ser encontrada na referência [31].

onde $\psi_H^{(\dagger)}$ são operadores fermiônicos² na representação de Heisenberg e T é o operador de ordenamento temporal; ele move o operador de maior tempo para a esquerda. A relevância dessa função no formalismo de equilíbrio deve-se a existência de uma expansão diagramática para G^t [32].

No formalismo de não equilíbrio também existe uma quantidade que possui uma expansão diagramática: a função de Green ordenada no contorno. Uma vez introduzida essa função ao formalismo de Keldysh, ele se torna estruturalmente idêntico a teoria de equilíbrio [33]. Essa função é definida da seguinte forma

$$G(t_1, t'_1) = -i \langle T_C \psi_H(t_1) \psi_H^\dagger(t'_1) \rangle, \quad (2.11)$$

onde C é um contorno que inicia e termina em t_0 , caminha ao longo do eixo real e passa por t_1 e t'_1 somente uma vez [Fig.2.1]. Em geral adota-se $t_0 \rightarrow -\infty$ [31]; assim o contorno começa em $-\infty$, passa pelos pontos t_1 e t'_1 , e retorna a $-\infty$. Outro ponto que temos que destacar na equação (2.11) é o operador de ordenamento no contorno T_c , que atua da seguinte forma

$$T_C \psi_H(t_1) \psi_H^\dagger(t'_1) \equiv \begin{cases} \psi_H(t_1) \psi_H^\dagger(t'_1) & \text{se } t_1 >_C t'_1, \\ -\psi_H^\dagger(t'_1) \psi_H(t_1) & \text{se } t_1 <_C t'_1. \end{cases} \quad (2.12)$$

Observe que a diferença entre o operador de ordenamento temporal e o operador definido na equação (2.12) encontra-se nas desigualdades: $t_1 >_C t'_1$ e $t_1 <_C t'_1$, que indicam maior e menor ao longo do contorno.

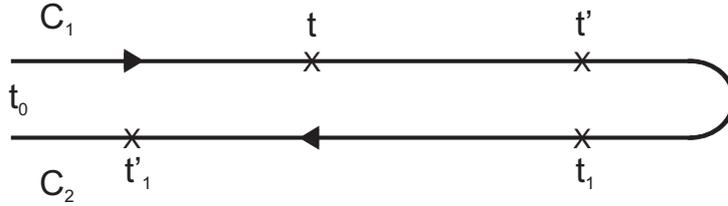


Figura 2.1: Contorno do tempo utilizado na Função de Green Ordenado no Contorno.

Nesse ponto é interessante entender melhor o que significa essas desigualdades do operador de ordenamento no contorno. Exemplificando, imagine que t e t' estão dispostos no contorno como aparece na figura 2.1. Seguindo o contorno começando em t_0 (no ramo superior) e terminando em t_0 (no ramo inferior), bem como aparece o sentido indicado na figura, passamos primeiro

²A mesma definição pode ser aplicada para operadores de bósons.

pelo ponto t e posteriormente pelo ponto t' ; neste caso dizemos que $t <_C t'$. Entretanto observe os pontos t_1 e t'_1 na mesma figura. Seguindo o contorno no mesmo sentido ao anterior, passamos primeiro por t_1 e depois por t'_1 ; neste caso dizemos que $t_1 <_C t'_1$.

Agora, observe que se operássemos com o operador de ordenamento temporal (o operador utilizado no formalismo de equilíbrio) encontraríamos, para o primeiro caso, $t < t'$ (considerando o ramo superior uma “reta” crescente). Já no segundo caso $t_1 > t'_1$ (considerando o ramo inferior uma “reta” que cresce negativamente no sentido de t_0). Ou seja, o operador T ordena cronologicamente, enquanto o operador T_C ordena no contorno.

2.3 Outras Funções de Green

Quando estamos tratando de problemas de transporte quântico torna-se interessante definir algumas funções de Green específicas. São elas:

$$G^>(t_1, t'_1) = -i \langle \psi_H(t_1) \psi_H^\dagger(t'_1) \rangle, t_1 \in C_2, t'_1 \in C_1, \quad (2.13)$$

$$G^<(t_1, t'_1) = i \langle \psi_H^\dagger(t'_1) \psi_H(t_1) \rangle, t_1 \in C_1, t'_1 \in C_2, \quad (2.14)$$

$$\begin{aligned} G^a(t_1, t'_1) &= i\theta(t'_1 - t_1) \langle \{ \psi_H(t_1), \psi_H^\dagger(t'_1) \} \rangle \\ &= \theta(t'_1 - t_1) [G^<(t_1, t'_1) - G^>(t_1, t'_1)], \end{aligned} \quad (2.15)$$

$$\begin{aligned} G^r(t_1, t'_1) &= -i\theta(t_1 - t'_1) \langle \{ \psi_H(t_1), \psi_H^\dagger(t'_1) \} \rangle \\ &= \theta(t_1 - t'_1) [G^>(t_1, t'_1) - G^<(t_1, t'_1)], \end{aligned} \quad (2.16)$$

onde assumimos que o ramo superior do contorno é C_1 e o ramo inferior é C_2 , ou seja, essas funções já possuem um ordenamento bem definido; e também

$$\{A, B\} = AB + BA, \quad (2.17)$$

é o anticomutador de dois operadores A e B . Note que: $G^r - G^a = G^> - G^<$.

A vantagem de se trabalhar com as funções de Green avançada (G^a) e retardada (G^r) é que elas nos permitem descrever a dinâmica dos elétrons quando estes estão em um condutor. Além disso, essas duas funções satisfazem a equação de Dyson [equação (2.18)], quando uma auto-energia Σ pode ser definida. Já as funções de Green maior que ($G^>$) e menor que ($G^<$) estão relacionadas com o número de estados ocupados e desocupados do nosso sistema [34].

2.4 Continuação Analítica (Teorema de Langreth)

A função de Green ordenada no contorno é uma ferramenta matemática para tornar o formalismo de não-equilíbrio estruturalmente idêntico ao de equilíbrio. Entretanto, para calcularmos quantidades físicas precisamos conhecer as funções de correlação $G^<$ e $G^>$ e as funções G^r e G^a . Essas quatro funções de Green são obtidas a partir da função ordenada no contorno através do procedimento denominado continuação analítica.

Nosso ponto de partida será admitir que uma auto-energia Σ pode ser definida. Com isso, a função de Green ordenada no contorno [Equação (2.11)] obedece a equação de Dyson,

$$G(\tau_1, \tau'_1) = G^0(\tau_1, \tau'_1) + \int_C d\tau_2 \int_C d\tau_3 G^0(\tau_1, \tau_2) \Sigma(\tau_2, \tau_3) G(\tau_3, \tau'_1), \quad (2.18)$$

onde utilizamos a letra grega τ_i para indicar que o tempo t_i ($i = 1, 2, 3$) está sujeito ao ordenamento temporal ao longo do contorno C e, portanto a integral é feita ao longo desse contorno. Após o processo de continuação analítica esse tempo passará a ser o tempo ordinário, t_i , pois as funções de Green vão assumir uma das quatro formas apresentadas anteriormente [equações (2.13) - (2.16)], que possuem um ordenamento bem definido.

Estudaremos produtos de funções de Green da forma

$$C(t_1, t'_1) = \int_C d\tau A(t_1, \tau) B(\tau, t'_1), \quad (2.19)$$

e na equação (2.18) encontraremos produtos triplos (ou de mais termos), que são generalizações de produtos de duas funções. Para resolver a integral acima, vamos assumir que $t_1 <_C t'_1$. Com isso $C^<(t_1, t'_1)$ é definido como na equação (2.14). A equação (2.19) pode ser escrita da seguinte forma

$$\begin{aligned} C^<(t_1, t'_1) &= \int_{-\infty}^{t_1} d\tau A(t_1, \tau) B(\tau, t'_1) + \int_{t_1}^{t'_1} d\tau A(t_1, \tau) B(\tau, t'_1) \\ &+ \int_{-\infty}^{t'_1} d\tau A(t_1, \tau) B(\tau, t'_1). \end{aligned} \quad (2.20)$$

Fazendo

$$\int_{t_1}^{t'_1} \rightarrow \int_{t_1}^{-\infty} + \int_{-\infty}^{t'_1}$$

Podemos reescrever a equação (2.20) como

$$\begin{aligned}
C^<(t_1, t'_1) &= \int_{-\infty}^{t_1} d\tau A(t_1, \tau) B(\tau, t'_1) + \int_{t_1}^{-\infty} d\tau A(t_1, \tau) B(\tau, t'_1) \\
&+ \int_{-\infty}^{t'_1} d\tau A(t_1, \tau) B(\tau, t'_1) + \int_{-\infty}^{t'_1} d\tau A(t_1, \tau) B(\tau, t'_1). \quad (2.21)
\end{aligned}$$

A equação (2.21) equivale ao contorno ilustrado na figura 2.2; observe que o contorno dessa figura, comparado ao da figura 2.1, foi deformado. Esse processo de deformar o contorno de integração para efetuar a continuação analítica de um produto de funções de Green foi originalmente proposto por D. C. Langreth [35] e, por isso esse processo também é conhecido como Teorema de Langreth.

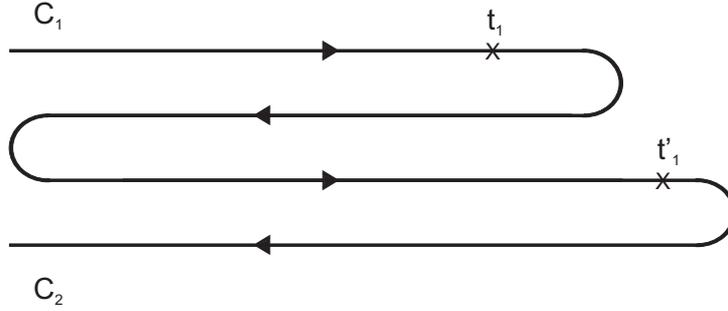


Figura 2.2: Contorno deformado para se obter a continuação analítica.

Aplicando as definições de função de Green menor e maior obtemos, por exemplo, para o primeiro termo da equação acima $\int_{-\infty}^{t_1} d\tau A(t_1, \tau) B(\tau, t'_1)$ o seguinte $\int_{-\infty}^{t_1} dt A^>(t_1, t) B^<(t, t'_1)$, pois essa integral envolve tempos t menores que t_1 e t'_1 no sentido do contorno. Pensando da mesma forma para os demais termos, encontramos que

$$\begin{aligned}
C^<(t_1, t'_1) &= \int_{-\infty}^{t_1} dt A^>(t_1, t) B^<(t, t'_1) + \int_{t_1}^{-\infty} dt A^<(t_1, t) B^<(t, t'_1) + \\
&+ \int_{-\infty}^{t'_1} dt A^<(t_1, t) B^<(t, t'_1) + \int_{-\infty}^{t'_1} dt A^<(t_1, t) B^>(t, t'_1). \quad (2.22)
\end{aligned}$$

Observe que nessa última equação não precisamos falar em integrais ordenadas no contorno pois esse ordenamento já está embutido nas funções de Green maior e menor. Invertendo os limites de integração do segundo e

quarto termo e os agrupando com o primeiro e terceiro, respectivamente, temos

$$\begin{aligned}
C^<(t_1, t'_1) &= \int_{-\infty}^{t_1} dt [A^>(t_1, t) - A^<(t_1, t)] B^<(t, t'_1) + \\
&+ \int_{-\infty}^{t'_1} dt A^<(t_1, t) [B^<(t, t'_1) - B^>(t, t'_1)]. \quad (2.23)
\end{aligned}$$

E, utilizando-se de uma função degrau, podemos estender os limites de integração a $+\infty$ e escrever

$$\begin{aligned}
C^<(t_1, t'_1) &= \int_{-\infty}^{+\infty} dt \theta(t_1 - t) [A^>(t_1, t) - A^<(t_1, t)] B^<(t, t'_1) + \\
&+ \int_{-\infty}^{+\infty} dt A^<(t_1, t) \theta(t'_1 - t) [B^<(t, t'_1) - B^>(t, t'_1)]. \quad (2.24)
\end{aligned}$$

Com isso, podemos utilizar as definições (2.15) e (2.16) para as funções de Green avançada e retardada, e escrevermos

$$C^<(t_1, t'_1) = \int_{-\infty}^{+\infty} dt A^r(t_1, t) B^<(t, t'_1) + \int_{-\infty}^{+\infty} dt A^<(t_1, t) B^a(t, t'_1). \quad (2.25)$$

Encontramos $C^>$ trocando $<$ por $>$ na equação acima, tal que, de forma simplificada, temos:

$$C^< = A^r B^< + A^< B^a \quad (2.26)$$

$$C^> = A^r B^> + A^> B^a. \quad (2.27)$$

Esse resultado pode ser facilmente generalizado para um produto de funções de Green da forma $D = ABC$ ³:

$$D = ABC \Rightarrow D^< = A^r B^r C^< + A^r B^< C^a + A^< B^a C^a. \quad (2.28)$$

No caso da função de Green retardada, encontramos substituindo a equação para $C^<$ e $C^>$ em (3.16):

$$\begin{aligned}
C^r(t_1, t'_1) &= \theta(t_1 - t'_1) [C^>(t_1, t'_1) - D^<(t_1, t'_1)] \\
&= \theta(t_1 - t'_1) \int_{-\infty}^{+\infty} dt [A^r (B^> - B^<) + (A^> - A^<) B^a]
\end{aligned}$$

³Nessa notação o produto de funções de Green corresponde a uma integração na variável temporal.

$$\begin{aligned}
&= \theta(t_1 - t'_1) \int_{-\infty}^{+\infty} dt [A^r(B^r - B^a) + (A^r - A^a)B^a] \\
&= \theta(t_1 - t'_1) \int_{-\infty}^{+\infty} dt [A^r B^r - A^a B^a] \\
&= \int_{-\infty}^{+\infty} A^r(t_1, t) B^r(t, t'_1). \tag{2.29}
\end{aligned}$$

Ou seja, a função C^r é simplesmente o produto das funções de Green retardadas:

$$C^r = A^r B^r. \tag{2.30}$$

Já que o mesmo raciocínio pode ser usado para encontrar a função de Green avançada; a função de Green avançada C^a é simplesmente o produto das funções de Green avançadas:

$$C^a = A^a B^a. \tag{2.31}$$

Utilizando o Formalismo de Keldysh e utilizando o teorema de Langreth para resolver integrais ordenadas no contorno estamos aptos a encontrar médias de sistemas fora do equilíbrio.

Capítulo 3

Bombeamento Quântico de Elétrons

A idéia básica de bombear elétrons e gerar uma corrente dc através de um condutor na ausência de uma voltagem de calibre surgiu no trabalho pioneiro de Thouless [36]. Isso foi realizado aplicando perturbações dependentes do tempo no condutor.

Usando a idéia de Thouless, Brouwer [37] estudou, por meio de aproximação de espalhamento, o bombeamento quântico de elétrons em um ponto quântico sem interação. Já experimentalmente, o primeiro trabalho de bombeamento de elétrons nesse tipo de sistema foi feito por Pothier *et al.*, que observaram a quantização de carga do regime de bloqueio de Coulomb [38].

No nosso estudo, entretanto, estamos interessados em bombeamento em sistemas com interação no regime de bloqueio de Coulomb [39, 40]. Usando o formalismo apresentado no capítulo anterior, vamos tratar o bombeamento de elétrons em um único ponto quântico considerando a interação eletrônica. Estamos interessados, em particular, no regime de bloqueio de Coulomb. Esse mesmo tipo de estudo foi feito por Hernández *et al.* [41].

Na próxima seção apresentaremos o Hamiltoniano usado para descrever a dinâmica do ponto quântico com interação e dependência temporal.

3.1 Modelo

Estamos interessados em estudar como se dá o transporte quando bombeamos elétrons adiabaticamente através de um ponto quântico com dependência temporal. Escolhemos que dois parâmetros variem no tempo: a energia dos estados localizados $\epsilon_s(t)$ e a hibridização $V_{k\alpha}(t)$; e para garantir que estamos no regime de bloqueio de Coulomb temos que considerar que a tempera-

tura de Kondo é muito baixa, $T_K \ll T$, como explicado no capítulo 1 dessa dissertação. Fazendo essa consideração, definimos um cenário onde a aproximação de campo médio funciona bem. Essa aproximação que vamos utilizar nesse trabalho.

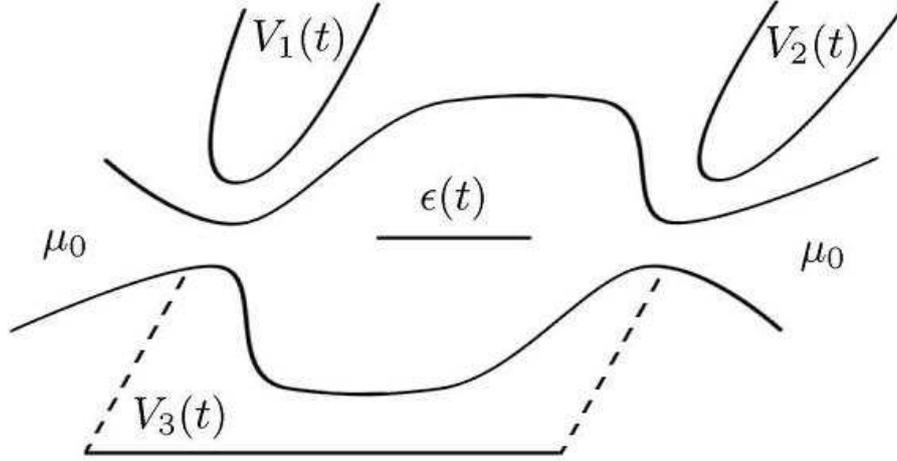


Figura 3.1: Figura esquemática do bombeamento de elétrons em um ponto quântico com única ressonância. $V_1(t)$ e $V_2(t)$ produzem variação temporal nos acoplamentos e $V_3(t)$ introduz variação na ressonância.

Vamos considerar um ponto quântico com uma única ressonância, no regime de bloqueio de Coulomb, com o potencial no ponto sendo controlado por uma voltagem de calibre $V_3(t)$, tal que $\epsilon_s(t) = \epsilon_{0s} - \eta e V_3(t)$, onde $e > 0$ é a carga do elétron e η é uma constante que controla o acoplamento entre o ponto e $V_3(t)$ [Figura (3.1)]. Assim, podemos dividir nosso Hamiltoniano em três partes. Na parte que diz respeito ao ponto temos

$$H_{\text{ponto}} = \sum_{s=\uparrow,\downarrow} \epsilon_s(t) d_s^\dagger d_s + U n_\uparrow n_\downarrow, \quad (3.1)$$

onde $n_s = d_s^\dagger d_s$ é o operador número e d_s^\dagger (d_s) é o operador de criação (aniquilação) de elétrons no ponto quântico, com energia $\epsilon_s(t)$. O ponto quântico encontra-se em contato com dois reservatórios por meio de fios quânticos, denotado L o reservatório a esquerda do ponto quântico e R o reservatório a direita. Assumindo que os elétrons nesses fios não interagem, podemos es-

crever o Hamiltoniano dos elétrons nos fios como

$$H_{fio} = \sum_k \sum_{\alpha=L,R} \sum_{s=\uparrow,\downarrow} \epsilon_{k\alpha s} c_{k\alpha s}^\dagger c_{k\alpha s}, \quad (3.2)$$

onde $c_{k\alpha s}^\dagger$ ($c_{k\alpha s}$) é o operador de criação (aniquilação) dos elétrons com momento k e spin s no fio α . O ponto quântico é separado dos fios por barreiras de tunelamento controladas independentemente por meio de voltagens dependentes do tempo $V_{k\alpha}(t)$ e $V_{k\alpha}^*(t)$. Então, o Hamiltoniano do acoplamento é

$$H_{ponto-fio} = \sum_{k,\alpha,s} [V_{k\alpha}(t) c_{k\alpha s}^\dagger d_s + V_{k\alpha}^*(t) d_s^\dagger c_{k\alpha s}]. \quad (3.3)$$

Assim, o Hamiltoniano total do modelo estudado será a soma das três contribuições descritas anteriormente,

$$H = H_{ponto} + H_{fio} + H_{fio-ponto}. \quad (3.4)$$

Observe que quando escrevemos as três contribuições explicitamente no Hamiltoniano total teremos dois termos com dependência temporal explícita: $\epsilon_s(t)$, $V_{k\alpha}(t)$ [$V_{k\alpha}^*(t)$].

Uma vez definido o Hamiltoniano do nosso sistema, ou seja, uma vez que nosso sistema foi modelado matematicamente, estamos interessados em calcular suas propriedades físicas, como por exemplo o número de ocupação médio. Ele é encontrado usando a equação abaixo:

$$\langle n_s^{(i)}(t) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi i} G_{s,s}^{(i)<}(\omega, t), \quad (3.5)$$

onde o índice i diz respeito as contribuições de ordem i .

3.2 Corrente de Bombeamento

O Hamiltoniano $H_{ponto-fio}$ gera um acoplamento entre os elétrons dos fios com os do ponto quântico (através da hibridização $V_{k\alpha}(t)$). Isso, combinado com o termo de energia do ponto, $\epsilon_s(t)$, torna a evolução temporal do sistema um problema não-trivial de muitos corpos. E, é devido a essa evolução que surge uma corrente dependente do tempo através do ponto, essa corrente também é conhecida como corrente de bombeamento.

Em primeira análise, parece não ter sentido o aparecimento de uma corrente, uma vez que os reservatórios encontram-se com o mesmo potencial químico μ_0 [Figura (3.1)]. Entretanto, devido a dependência temporal dos parâmetros $V_{k\alpha}(t)$ e $\epsilon_s(t)$ é possível “criar” essa corrente.

A expressão geral para essa corrente dependente do tempo em termos das funções de Green do ponto quântico, $G_{s,s}(t, t')$, foi desenvolvida nas referências [31, 42], e é escrita como

$$J_\alpha(t) = -\frac{2e}{\hbar} \text{Im} \left[\sum_{k,s} \int_{-\infty}^t dt' V_{k\alpha}^*(t') e^{i\epsilon_{k\alpha s}(t-t')/\hbar} V_{k\alpha}(t) \left[f_\alpha(\epsilon_{k\alpha s}) G_{s,s}^r(t, t') + G_{s,s}^<(t, t') \right] \right], \quad (3.6)$$

onde $f_\alpha(E) = [e^{(E-\mu_\alpha)/k_B T} + 1]^{-1}$ é a função de Fermi-Dirac para o fio α mantido a um potencial químico μ_α , T é a temperatura e k_B é a constante de Boltzmann. Como estamos tratando do problema da figura (3.1), vamos considerar que $\mu_R = \mu_L = \epsilon_F$.

Na próxima seção calcularemos $G_{s,s}(t, t')$ e posteriormente $G_{s,s}^r(t, t')$ e $G_{s,s}^<(t, t')$, de acordo com o capítulo 2.

3.3 Função de Green do Ponto Quântico

Para calcular o número de ocupação médio, bem como outras grandezas referentes ao problema, temos que definir uma função de Green; ela será dada por:

$$G_{s,s}(t, t') \equiv \ll d_s(t) | d_s^\dagger(t') \gg. \quad (3.7)$$

A média acima não pode ser calculada com o procedimento usual em problemas de muitos corpos, pois essa é uma média que envolve comutadores calculados em tempos distintos: t e t' . Para realizar esse tipo de média temos que utilizar o formalismo de Keldysh introduzido no capítulo 2. Mesmo usando um formalismo diferente, a forma de resolver o problema muito se assemelha ao formalismo de função de Green; o passo inicial é calcular a equação de movimento da função de Green:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \ll d_s(t) | d_s^\dagger(t') \gg = \delta(t-t') \langle \{d_s(t), d_s^\dagger(t')\} \rangle + \ll [d_s(t), H] | d_s^\dagger(t') \gg, \quad (3.8)$$

onde usamos

$$\{d_{i\sigma}, d_{j\sigma'}^\dagger\} = \delta_{ij} \delta_{\sigma\sigma'} \quad (3.9)$$

$$\{d_{i\sigma}, d_{j\sigma'}\} = \{d_{i\sigma}^\dagger, d_{j\sigma'}^\dagger\} = 0. \quad (3.10)$$

Assim,

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \ll d_s(t) | d_s^\dagger(t') \gg = \delta(t-t') + \ll [d_s(t), H] | d_s^\dagger(t') \gg. \quad (3.11)$$

Observe o segundo termo do lado direito da equação acima, temos que comutar d_s com os termos que compõe o Hamiltoniano H , ou seja, calcular os seguintes comutadores:

$$[d_s, H] \rightarrow [d_s, d_s^\dagger d_{s'}], [d_s, n_\uparrow n_\downarrow], [d_s, c_{s'}^\dagger c_{s'}], [d_s, c_{s'}^\dagger d_{s'}], [d_s, d_{s'}^\dagger c_{s'}],$$

[observe que omitimos o índice de momento k e o índice referente ao canal α]. O primeiro comutador é

$$\begin{aligned} [d_s, d_s^\dagger d_{s'}] &= d_s^\dagger [d_s, d_{s'}] + [d_s, d_s^\dagger] d_{s'} \\ &= d_s^\dagger d_s d_{s'} - d_s^\dagger d_{s'} d_s + d_s d_s^\dagger d_{s'} - d_s^\dagger d_s d_{s'}, \end{aligned}$$

usando as relações (3.9) e (3.10), escrevemos

$$\begin{aligned} [d_s, d_s^\dagger d_{s'}] &= -d_s^\dagger d_{s'} d_s + d_s d_s^\dagger d_{s'} \\ &= d_s d_s^\dagger d_{s'} + \delta_{ss'} d_{s'} - d_s d_s^\dagger d_{s'} \\ &= \delta_{ss'} d_{s'}. \end{aligned}$$

Então

$$[d_s, d_s^\dagger d_{s'}] = d_s. \quad (3.12)$$

Usando a seguinte relação de comutadores

$$[A, BC] = B[A, C] + [A, B]C, \quad (3.13)$$

podemos calcular o segundo comutador

$$\begin{aligned} [d_s, n_\uparrow n_\downarrow] &= d_\uparrow^\dagger d_\uparrow [d_s, d_\downarrow^\dagger d_\downarrow] + [d_s, d_\uparrow^\dagger d_\uparrow] d_\downarrow^\dagger d_\downarrow \\ &= d_\uparrow^\dagger d_\uparrow d_s d_\downarrow^\dagger d_\downarrow - d_\uparrow^\dagger d_\uparrow d_\downarrow^\dagger d_\downarrow d_s + d_s d_\uparrow^\dagger d_\uparrow d_\downarrow^\dagger d_\downarrow - d_\uparrow^\dagger d_\uparrow d_s d_\downarrow^\dagger d_\downarrow \end{aligned}$$

trocando a ordem de d_\downarrow com d_s e cancelando o primeiro e último termo, temos

$$[d_s, n_\uparrow n_\downarrow] = d_\uparrow^\dagger d_\uparrow d_\downarrow^\dagger d_s d_\downarrow + d_s d_\uparrow^\dagger d_\uparrow d_\downarrow^\dagger d_\downarrow,$$

agora usamos que $d_\downarrow^\dagger d_s = \delta_{s\downarrow} - d_s d_\downarrow^\dagger$

$$[d_s, n_\uparrow n_\downarrow] = n_\downarrow d_\downarrow \delta_{s\downarrow} - d_\uparrow^\dagger d_\uparrow d_s d_\downarrow^\dagger d_\downarrow + d_s n_\uparrow n_\downarrow$$

trocando a ordem de d_\uparrow com d_s

$$[d_s, n_\uparrow n_\downarrow] = d_s n_\uparrow n_\downarrow + n_\downarrow d_\downarrow \delta_{s\downarrow} + d_\uparrow^\dagger d_s d_\uparrow n_\downarrow$$

agora, $d_{\uparrow}^{\dagger}d_s = \delta_{s\uparrow} - d_s d_{\downarrow}^{\dagger}$, assim o último termo da equação acima transforma-se em dois e fica: $\delta_{s\uparrow}d_{\uparrow}n_{\downarrow} - d_s n_{\uparrow}n_{\downarrow}$. Cancelando os termos simétricos, temos

$$[d_s, n_{\uparrow}n_{\downarrow}] = \delta_{s\downarrow}n_{\uparrow}d_{\downarrow} + \delta_{s\uparrow}d_{\uparrow}n_{\downarrow} = \begin{cases} d_{\uparrow}n_{\downarrow} = d_s n_{\bar{s}} & \text{se } s = \uparrow \\ d_{\downarrow}n_{\uparrow} = d_s n_{\bar{s}} & \text{se } s = \downarrow \end{cases}$$

$$[d_s, n_{\uparrow}n_{\downarrow}] = d_s n_{\bar{s}}. \quad (3.14)$$

O terceiro comutador é

$$[d_s, c_s^{\dagger}c_{s'}] = c_s^{\dagger}[d_s, c_{s'}] + [d_s, c_s^{\dagger}]c_{s'} = 0, \quad (3.15)$$

onde usamos que dois comutadores de férmions diferentes comutam. Usaremos o mesmo argumento para calcular o quarto comutador (no segundo comutador da igualdade abaixo)

$$\begin{aligned} [d_s, c_s^{\dagger}d_{s'}] &= c_s^{\dagger}[d_s, d_{s'}] + [d_s, c_s^{\dagger}]d_{s'} \\ &= c_s^{\dagger}d_s d_{s'} - c_s^{\dagger}d_{s'}d_s = 0. \end{aligned} \quad (3.16)$$

Aqui, mesmo $[d_{s'}, d_s] \neq 0$, nessa situação os dois termos resultarão em um mesmo estado: dois elétrons são criados em d_s e $d_{s'}$, respectivamente e um aniquilado em c_s^{\dagger} .

O próximo comutador a ser calculado é:

$$\begin{aligned} [d_s, d_s^{\dagger}c_{s'}] &= d_s d_s^{\dagger}c_{s'} - d_s^{\dagger}c_{s'}d_s \\ &= d_s d_s^{\dagger}c_{s'} + d_s^{\dagger}d_s c_{s'}, \end{aligned}$$

usando que $d_s^{\dagger}d_s = \delta_{ss'} - d_s d_{s'}^{\dagger}$, temos

$$\begin{aligned} [d_s, d_s^{\dagger}c_{s'}] &= d_s d_s^{\dagger}c_{s'} + \delta_{ss'}c_{s'} - d_s d_{s'}^{\dagger}c_{s'} \\ &= \delta_{ss'}c_{s'} \\ &= c_s. \end{aligned} \quad (3.17)$$

Assim, podemos reescrever a equação de movimento (3.8) usando o resultado dos comutadores anteriormente calculados:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} G_{ss}(t, t') &= \delta(t - t') + \epsilon_s(t) \ll d_s(t) | d_s^{\dagger}(t') \gg + U \ll d_s(t) n_{\bar{s}}(t) | d_s^{\dagger}(t') \gg \\ &+ \sum_{k, \alpha} V_{kas}^*(t) \ll c_s(t) | d_s^{\dagger}(t') \gg, \end{aligned} \quad (3.18)$$

observe que, num processo recorrente, sempre que calculamos equações de movimento das funções de Green geramos funções de Green de ordem superior; estas são de ordem superior pois, normalmente, envolvem produtos com mais operadores que a primeira função de Green. Neste caso, geramos as duas funções de Green abaixo

$$G_{s\bar{s},s}^{(2)}(t,t') \equiv \ll d_s(t)n_{\bar{s}}(t) | d_s^\dagger(t') \gg \quad (3.19)$$

$$G_{k\alpha s,s}(t,t') \equiv \ll c_s(t) | d_s^\dagger(t') \gg . \quad (3.20)$$

Podemos agora, reescrever a equação (3.18) usando as definições acima, e também a definição (3.7):

$$\begin{aligned} \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - \epsilon_s(t) \right) G_{ss}(t,t') &= \delta(t-t') + U G_{s\bar{s},s}^{(2)}(t,t') \\ &+ \sum_{k,\alpha} V_{k\alpha s}^*(t) G_{k\alpha s,s}(t,t'). \end{aligned} \quad (3.21)$$

Agora poderíamos calcular as equações de movimento para as duas funções de Green secundárias: $G_{s\bar{s},s}^{(2)}(t,t')$ e $G_{k\alpha s,s}(t,t')$, como feito no trabalho de Hernández *et al.* [41]. Entretanto, como posteriormente faremos um desacoplamento na função de Green $G_{s\bar{s},s}^{(2)}(t,t')$, vamos evitar cálculos desnecessários. Calcularemos apenas a equação de movimento da função de Green $G_{k\alpha s,s}(t,t')$. Escrevemos, então,

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \ll c_s(t) | d_s^\dagger(t') \gg &= i\delta(t-t') \langle \{c_s(t), d_s^\dagger(t')\} \rangle \\ &+ \ll [c_s(t), H] | d_s^\dagger(t') \gg, \end{aligned}$$

o anticomutador escrito na equação acima é igual a zero pois trata-se de operadores fermiônicos agindo em espaços diferentes. Portanto a equação fica

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \ll c_s(t) | d_s^\dagger(t') \gg = \ll [c_s(t), H] | d_s^\dagger(t') \gg . \quad (3.22)$$

Agora, temos que comutar c_s com os termos que compõe o Hamiltoniano H , ou seja, calcular os seguintes comutadores:

$$[c_s, H] \rightarrow [c_s, d_s^\dagger d_{s'}], [c_s, n_\uparrow n_\downarrow], [c_s, c_s^\dagger c_{s'}], [c_s, c_s^\dagger d_{s'}], [c_s, d_{s'}^\dagger c_{s'}].$$

Calculando-os separadamente

$$[c_s, d_s^\dagger d_{s'}] = d_{s'}^\dagger [c_s, d_{s'}] + [c_s, d_{s'}^\dagger] d_{s'} = 0; \quad (3.23)$$

$$\begin{aligned}
[c_s, n_\uparrow n_\downarrow] &= n_\uparrow [c_s, d_\downarrow^\dagger d_\downarrow] + [c_s, d_\uparrow^\dagger d_\uparrow] n_\downarrow \\
&= n_\uparrow \{d_\downarrow^\dagger [c_s, d_\downarrow] + [c_s, d_\downarrow^\dagger]\} + \{d_\uparrow^\dagger [c_s, d_\uparrow] + [c_s, d_\uparrow^\dagger] d_\uparrow\} n_\downarrow \\
&= 0;
\end{aligned} \tag{3.24}$$

$$\begin{aligned}
[c_s, c_s^\dagger c_{s'}] &= c_s^\dagger [c_s, c_{s'}] + [c_s, c_s^\dagger] c_{s'} \\
&= c_s^\dagger c_s c_{s'} - c_s^\dagger c_{s'} c_s + c_s c_s^\dagger c_{s'} - c_s^\dagger c_s c_{s'},
\end{aligned}$$

cancelando os termos simétricos, invertendo $c_{s'}$ com c_s e finalmente usando a relação: $c_s^\dagger c_s = \delta_{ss'} - c_s c_s^\dagger$, escrevemos

$$\begin{aligned}
[c_s, c_s^\dagger c_{s'}] &= c_s c_s^\dagger c_{s'} + \delta_{ss'} c_{s'} - c_s c_s^\dagger c_{s'} \\
&= \delta_{ss'} c_{s'} = c_{s'};
\end{aligned} \tag{3.25}$$

$$\begin{aligned}
[c_s, c_{s'}^\dagger d_{s'}] &= c_{s'}^\dagger [c_s, d_{s'}] + [c_s, c_{s'}^\dagger] d_{s'} \\
&= c_{s'}^\dagger c_s d_{s'} - c_{s'}^\dagger d_{s'} c_s + c_s c_{s'}^\dagger d_{s'} - c_{s'}^\dagger c_s d_{s'},
\end{aligned}$$

cancelando os termos simétricos, invertendo $d_{s'}$ com c_s e finalmente usando a relação: $c_s^\dagger c_s = \delta_{ss'} - c_s c_s^\dagger$, escrevemos

$$\begin{aligned}
[c_s, c_{s'}^\dagger d_{s'}] &= c_s c_{s'}^\dagger d_{s'} + \delta_{ss'} d_{s'} - c_s c_{s'}^\dagger c_{s'} \\
&= \delta_{ss'} d_{s'} = d_{s'};
\end{aligned} \tag{3.26}$$

$$[c_s, d_{s'}^\dagger c_{s'}] = d_{s'}^\dagger [c_s, c_{s'}] + [c_s, d_{s'}^\dagger] c_{s'} = 0. \tag{3.27}$$

Por fim, reescrevendo a equação (3.22), ficamos com

$$\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - \epsilon_{k\alpha s} \right) G_{k\alpha s, s}(t, t') = V_{k\alpha}(t) G_{s, s}(t, t'). \tag{3.28}$$

Com as duas equações de movimento calculadas, (3.21) e (3.28), estamos aptos a fazer os desacoplamentos necessários para resolver o problema.

3.3.1 Aproximação de Campo Médio

A título de resolver o problema temos que introduzir uma aproximação para que as equações (3.21) e (3.28) sejam resolvidas. Como observado no início desse capítulo, estamos trabalhando em um regime onde a aproximação de campo médio funciona bem. Portanto, vamos utilizá-la na função de Green $G_{s\bar{s},s}^{(2)}(t, t')$, diferente do trabalho de Hernández *et al.* [13] que usa a essa aproximação em uma função de Green de ordem superior. Podemos, então, escrever $G_{s\bar{s},s}^{(2)}(t, t')$ da seguinte forma

$$G_{s\bar{s},s}^{(2)}(t, t') = \langle n_{\bar{s}}(t) \rangle G_{s,s}(t, t'). \quad (3.29)$$

Assim reescrevemos a equação (3.21)

$$\begin{aligned} \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - \epsilon_s(t) - U \langle n_{\bar{s}}(t) \rangle \right) G_{s,s}(t, t') &= \delta(t - t') \\ &+ \sum_{k\alpha} V_{k\alpha}^*(t) G_{k\alpha s, s}(t, t'). \end{aligned} \quad (3.30)$$

Como resumo dos cálculos que já fizemos, é interessante separar as equações importantes do problema:

$$\begin{cases} \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - \epsilon_s(t) - U \langle n_{\bar{s}}(t) \rangle \right) G_{s,s}(t, t') = \delta(t - t') + \sum_{k\alpha} V_{k\alpha}^*(t) G_{k\alpha s, s}(t, t') \\ \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - \epsilon_{k\alpha s} \right) G_{k\alpha s, s}(t, t') = V_{k\alpha}(t) G_{s,s}(t, t') \end{cases}$$

submetidas a aproximação (3.29). Se observarmos, temos um sistema com duas equações, e queremos resolvê-las. Para tal precisamos definir funções de Green auxiliares. Estas são definidas como se segue

$$\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - \epsilon_s(t) - U \langle n_{\bar{s}}(t) \rangle \right) g_s^U(t, t') = \delta(t - t'); \quad (3.31)$$

$$\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - \epsilon_{k\alpha s} \right) g_{k\alpha s}(t, t') = \delta(t - t'); \quad (3.32)$$

observe que, por definição, $g_{k\alpha s}(t, t')$ é uma função $g_{k\alpha s}(t - t')$. Também precisamos da seguinte propriedade:

Tendo duas equações deste tipo:

$$[\partial_t + A(t)]g(t, t') = \delta(t - t'),$$

onde $A(t)$ é um operador e

$$[\partial_t + A(t)]G(t, t') = F(t, t')$$

podemos escrever,

$$G(t, t') = \int dt_1 g(t, t_1) F(t_1, t'). \quad (3.33)$$

Onde essa propriedade é verificada quando derivamos os dois lados da equação (3.33), usamos a primeira equação descrita na propriedade e encontramos a segunda equação.

Com as equações (3.31), (3.32) e (3.33) escrevemos as soluções para as funções de Green envolvidas no problema

$$G_{s,s}(t, t') = g_s^U(t, t') + \sum_{k,\alpha} \int dt_1 g_s^U(t, t_1) V_{k\alpha}^*(t_1) G_{k\alpha,s}(t_1, t), \quad (3.34)$$

que é uma equação tipo Dyson; e

$$G_{k\alpha,s}(t, t') = \int dt_1 g_{k\alpha s}(t - t_1) V_{k\alpha}(t_1) G_{s,s}(t_1, t), \quad (3.35)$$

onde usamos o fato de $g_{k\alpha s}$ ser uma função somente da diferença temporal.

Nesse ponto temos que trabalhar um pouco mais com a equação (3.34). Vamos substituir $G_{k\alpha s}(t, t')$ pela expressão da equação (3.35), assim

$$\begin{aligned} G_{s,s}(t, t') &= g_s^U(t, t') + \sum_{k\alpha} \int dt_1 g_s^U(t, t_1) V_{k\alpha}^*(t_1) \int dt_2 g_{k\alpha s}(t_1 - t_2) V_{k\alpha s}(t_2) G_{s,s}(t_2, t') \\ &= g_s^U(t, t') + \int dt_1 \int dt_2 g_s^U(t, t_1) \sum_{k\alpha} V_{k\alpha}^*(t_1) g_{k\alpha s}(t_1 - t_2) V_{k\alpha s}(t_2) G_{s,s}(t_2, t'), \end{aligned} \quad (3.36)$$

onde dessa equação definimos a chamada auto-energia:

$$\Sigma_{s,s}(\tau, \tau') \equiv \sum_{k\alpha} V_{k\alpha}^*(\tau) g_{k\alpha s}(\tau - \tau') V_{k\alpha}(\tau'). \quad (3.37)$$

Assim,

$$G_{s,s}(t, t') = g_s^U(t, t') + \int dt_1 \int dt_2 g_s^U(t, t_1) \Sigma_{s,s}(t_1 - t_2) G_{s,s}(t_2, t'). \quad (3.38)$$

Se observarmos, as equações (3.35) e (3.38) dependem explicitamente de dois tempos: t e t' e não é possível continuar resolvendo o problema somente com as ferramentas que utilizamos até agora. Na próxima seção faremos mais uma restrição ao nosso problema: que ele evolua adiabaticamente para então continuar os cálculos.

3.4 Regime Adiabático

O bombeamento de cargas em pontos quânticos possui duas escalas de tempo características: o tempo médio, τ , que o elétron permanece dentro do ponto e o inverso da frequência de bombeamento τ_{BOMB} (um valor típico de τ_{BOMB} é, por exemplo, 10ns).

Sendo $\tau_{BOMB} \gg \tau$, na medida que os potenciais do bombeamento são variados, o sistema evolui de uma situação estacionária a outra. Quando todos os reservatórios estão em equilíbrio térmico e com mesmo potencial químico, o sistema evolui entre situações de equilíbrio. Isso é o que se conhece como regime adiabático.

Na próxima seção usaremos a idéia do regime adiabático para reescrevermos a equação (3.38) em uma escala de tempo mais conveniente.

3.4.1 Reparametrização das Funções de Green

Vamos reparametrizar as funções de Green separando-as em duas escalas de tempo convenientes: tempo rápido ($\delta = t - t'$) e lento ($\bar{t} = (t' + t)/2$), da seguinte maneira:

$$G(t, t') \longrightarrow G\left(t - t', \frac{t + t'}{2}\right). \quad (3.39)$$

Reescrevendo a equação (3.38) nas novas escalas de tempo, temos

$$G_{s,s}(t - t', \bar{t}) = g_s^U(t - t', \bar{t}) + \int dt_1 \int dt_2 g_s^U\left(t - t_1, \frac{t + t_1}{2}\right) \times$$

$$\times \Sigma_{ss}(t_1, t_2) G_{s,s} \left(t_2 - t', \frac{t_2 + t'}{2} \right), \quad (3.40)$$

ou, usando a expressão da auto-energia ¹ (3.37)

$$\begin{aligned} G_{s,s}(t - t', \bar{t}) &= g_s^U(t - t', \bar{t}) + \int dt_1 \int dt_2 g_s^U \left(t - t_1, \frac{t + t_1}{2} \right) \times \\ &\times \left[\sum_{k\alpha} V_{k\alpha}^*(t_1) g_{k\alpha s}(t_1 - t_2) V_{k\alpha}(t_2) \right] G_{s,s} \left(t_2 - t', \frac{t_2 + t'}{2} \right). \end{aligned} \quad (3.41)$$

Nós implementaremos a aproximação adiabática de ordem mais baixa pela expansão da função de Green na variável lenta:

$$G \left(t - t', \frac{t + t'}{2} \right) \approx G(t - t', \bar{t}) + \left(\frac{t' - t}{2} \right) \frac{\partial G}{\partial \bar{t}}(t - t', \bar{t})|_{\bar{t}=t}, \quad (3.42)$$

onde os termos de ordem zero referem-se as quantidades de equilíbrio, enquanto as contribuições adiabáticas são lineares na variável de tempo lenta. Usando essa expansão na equação (3.32), temos

$$\begin{aligned} G_{s,s}(t - t', \bar{t}) &= g_s^U(t - t', \bar{t}) + \\ &+ \int dt_1 \int dt_2 \left[g_s^U(t - t_1, \bar{t}) + \left(\frac{t + t_1}{2} - \frac{t + t'}{2} \right) \frac{\partial}{\partial \bar{t}} g_s^U(t - t_1, \bar{t}) \right] \times \\ &\times \sum_{k\alpha} \left[V_{k\alpha}^*(\bar{t}) + \left(t_1 - \frac{t + t'}{2} \right) \dot{V}_{k\alpha}^*(\bar{t}) \right] g_{k\alpha s}(t_1 - t_2) \left[V_{k\alpha}(\bar{t}) + \left(t_2 - \frac{t + t'}{2} \right) \dot{V}_{k\alpha}(\bar{t}) \right] \times \\ &\times \left[G_{s,s}(t_2 - t', \bar{t}) + \left(\frac{t_2 - t'}{2} - \frac{t + t'}{2} \right) \frac{\partial}{\partial \bar{t}} G_{s,s}(t_2 - t', \bar{t}) \right], \end{aligned} \quad (3.43)$$

vale destacar que na equação acima aparece a derivada temporal em relação a \bar{t} de $V_{k\alpha}^{(*)}$, onde denotamos simplesmente por $\dot{V}_{k\alpha}^{(*)}$.

Neste ponto faremos uma pausa no cálculo da expressão de $G_{s,s}(t - t', \bar{t})$ e trabalharemos um pouco mais na expressão a seguir:

$$\sum_{k\alpha} \left[V_{k\alpha}^*(\bar{t}) + \left(t_1 - \frac{t + t'}{2} \right) \dot{V}_{k\alpha}^*(\bar{t}) \right] g_{k\alpha s}(t_1 - t_2) \left[V_{k\alpha}(\bar{t}) + \left(t_2 - \frac{t + t'}{2} \right) \dot{V}_{k\alpha}(\bar{t}) \right],$$

¹Essa aproximação que se faz na auto-energia do sistema é chamada de aproximação de tempo médio e é usada na ref [28]

multiplicando os termos

$$\begin{aligned}
& \sum_{k\alpha} V_{k\alpha}^*(\bar{t})g_{k\alpha s}(t_1 - t_2)V_{k\alpha}(\bar{t}) + \\
& + \sum_{k\alpha} \left(\frac{t_1 + t_1 - t - t' + t_2 - t_2}{2} \right) \dot{V}_{k\alpha}^*(\bar{t})g_{k\alpha s}(t_1 - t_2)V_{k\alpha}(\bar{t}) + \\
& + \sum_{k\alpha} \left(\frac{t_2 + t_2 - t - t' + t_1 - t_1}{2} \right) V_{k\alpha}^*(\bar{t})g_{k\alpha s}(t_1 - t_2)\dot{V}_{k\alpha}(\bar{t}),
\end{aligned}$$

desprezando os termos de segunda ordem na variável de tempo lenta, escrevemos

$$\begin{aligned}
& \sum_{k\alpha} V_{k\alpha}^*(\bar{t})g_{k\alpha s}(t_1 - t_2)V_{k\alpha}(\bar{t}) + \\
& + \sum_{k\alpha} \left(\frac{t_1 - t}{2} \right) \left[\dot{V}_{k\alpha}^*(\bar{t})g_{k\alpha s}(t_1 - t_2)V_{k\alpha}(\bar{t}) + V_{k\alpha}^*(\bar{t})g_{k\alpha s}(t_1 - t_2)\dot{V}_{k\alpha}(\bar{t}) \right] + \\
& + \sum_{k\alpha} \left(\frac{t_2 - t'}{2} \right) \left[\dot{V}_{k\alpha}^*(\bar{t})g_{k\alpha s}(t_1 - t_2)V_{k\alpha}(\bar{t}) + V_{k\alpha}^*(\bar{t})g_{k\alpha s}(t_1 - t_2)\dot{V}_{k\alpha}(\bar{t}) \right] + \\
& + \sum_{k\alpha} \left(\frac{t_1 - t_2}{2} \right) \left[\dot{V}_{k\alpha}^*(\bar{t})g_{k\alpha s}(t_1 - t_2)V_{k\alpha}(\bar{t}) - V_{k\alpha}^*(\bar{t})g_{k\alpha s}(t_1 - t_2)\dot{V}_{k\alpha}(\bar{t}) \right].
\end{aligned} \tag{3.44}$$

Observe que a primeira soma da equação (3.44) é a própria auto-energia e as duas próximas somas são proporcionais a derivada da auto energia, isto é,

$$\sum_{k\alpha} V_{k\alpha}^*(\bar{t})g_{k\alpha s}(t_1 - t_2)V_{k\alpha}(\bar{t}) \rightarrow \Sigma_{ss}$$

e

$$\left[\dot{V}_{k\alpha}^*(\bar{t})g_{k\alpha s}(t_1 - t_2)V_{k\alpha}(\bar{t}) + V_{k\alpha}^*(\bar{t})g_{k\alpha s}(t_1 - t_2)\dot{V}_{k\alpha}(\bar{t}) \right] \rightarrow \frac{\partial}{\partial \bar{t}} \Sigma_{ss}.$$

Assim, podemos reescrever a equação (3.44) da seguinte forma

$$\begin{aligned}
\Sigma_{ss}(t_1 - t_2, \bar{t}) & + \left(\frac{t_1 - t}{2} \right) \frac{\partial}{\partial \bar{t}} \Sigma_{ss}(t_1 - t_2, \bar{t}) + \left(\frac{t_2 - t'}{2} \right) \frac{\partial}{\partial \bar{t}} \Sigma_{ss}(t_1 - t_2, \bar{t}) + \\
& + \sum_{k\alpha} \left(\frac{t_1 - t_2}{2} \right) \left[\dot{V}_{k\alpha}^*(\bar{t})g_{k\alpha s}(t_1 - t_2)V_{k\alpha}(\bar{t}) - V_{k\alpha}^*(\bar{t})g_{k\alpha s}(t_1 - t_2)\dot{V}_{k\alpha}(\bar{t}) \right].
\end{aligned} \tag{3.45}$$

Finalmente, podemos retornar ao cálculo de $G_{s,s}(t-t', \bar{t})$. Substituindo (3.45) em (3.43) e realizando os produtos, escrevemos

$$\begin{aligned}
G_{s,s}(t-t', \bar{t}) &= g_s^U(t-t', \bar{t}) + \int dt_1 \int dt_2 g_s^U(t-t_1, \bar{t}) \Sigma_{ss}(t_1-t_2, \bar{t}) G_{s,s}(t_2-t', \bar{t}) - \\
&- \frac{1}{2} \int dt_1 \int dt_2 [(t_1-t_2) + (t-t_1)] g_s^U(t-t_1, \bar{t}) \Sigma_{ss}(t_1-t_2, \bar{t}) \frac{\partial}{\partial \bar{t}} G_{s,s}(t_2-t', \bar{t}) + \\
&+ \frac{1}{2} \int dt_1 \int dt_2 [(t_1-t_2) + (t_2-t')] \frac{\partial}{\partial \bar{t}} g_s^U(t-t_1, \bar{t}) \Sigma_{ss}(t_1-t_2, \bar{t}) G_{s,s}(t_2-t', \bar{t}) + \\
&+ \frac{1}{2} \int dt_1 \int dt_2 [(t_1-t) + (t_2-t')] g_s^U(t-t_1, \bar{t}) \frac{\partial}{\partial \bar{t}} \Sigma_{ss}(t_1-t_2, \bar{t}) G_{s,s}(t_2-t', \bar{t}) + \\
&+ \frac{1}{2} \int dt_1 \int dt_2 (t_1-t_2) g_s^U(t-t_1, \bar{t}) [\dot{V}_{k\alpha}^*(\bar{t}) V_{k\alpha}(\bar{t}) - V_{k\alpha}^*(\bar{t}) \dot{V}_{k\alpha}(\bar{t})] g_{k\alpha s}(t_1-t_2) G_{s,s}(t_2-t', \bar{t})
\end{aligned} \tag{3.46}$$

onde podemos colocar $g_{k\alpha s}(t_1-t_2)$ em evidência pois é uma função que depende somente da diferença dos tempos.

Queremos fazer a transformada de Fourier de $G_{s,s}(t-t', \bar{t})$ com respeito a variável rápida definida como

$$\mathfrak{S} [h(t-t', \bar{t})] = \int_{-\infty}^{\infty} d(t-t') \exp[i\hbar\omega(t-t')] h(t-t', \bar{t}). \tag{3.47}$$

Usando essa definição na equação (3.46) o lado esquerdo da igualdade e o primeiro termo do lado direito da igualdade são facilmente transformados

$$\mathfrak{S} [G_{s,s}(t-t', \bar{t})] = \int_{-\infty}^{\infty} d(t-t') \exp[i\hbar\omega(t-t')] G_{s,s}(t-t', \bar{t}) = G(\omega, \bar{t}) \tag{3.48}$$

$$\mathfrak{S} [g_s^U(t-t', \bar{t})] = g_s^U(\omega, \bar{t}), \tag{3.49}$$

Entretanto os termos que envolvem integrais são um pouco mais trabalhosos. Nesses termos é necessário o uso da definição de convolução

$$f_1(\tau) * f_2(\tau) = \int_{-\infty}^{+\infty} f_1(\tau') f_2(\tau' - \tau) d\tau', \tag{3.50}$$

e da seguinte propriedade da transformada de Fourier da convolução

$$\mathfrak{S}[f_1(\tau) * f_2(\tau)] = \mathfrak{S}[f_1(\tau)] \mathfrak{S}[f_2(\tau)]. \tag{3.51}$$

Assim, resolvendo cada integral da equação (3.46) separadamente, temos

$$\begin{aligned} \int dt_1 \int dt_2 g_s^U(t - t_1, \bar{t}) \Sigma_{ss}(t_1 - t_2, \bar{t}) G_{s,s}(t_2 - t', \bar{t}) = \\ \int dt_1 g_s^U(t - t_1, \bar{t}) \int dt_2 \Sigma_{ss}(t_1 - t_2, \bar{t}) G_{s,s}(t_2 - t', \bar{t}), \end{aligned}$$

onde colocamos a função $g_s^U(t - t_1, \bar{t})$ fora da integral de dt_2 pois ela não depende de t_2 . Fazendo as seguinte identificações:

$$\tau' = t_1 - t_2 \rightarrow d\tau' = -dt_2 \quad (3.52)$$

$$\tau - \tau' = t_2 - t' = \tau - t_1 + t_2 \Rightarrow \tau = t_1 - t', \quad (3.53)$$

podemos escrever

$$\int dt_1 g_s^U(t - t_1, \bar{t}) \left[- \int d\tau \Sigma_{ss}(\tau', \bar{t}) G_{s,s}(\tau - \tau', \bar{t}) \right], \text{ com } \tau = t_1 - t'$$

e usando a definição (3.48), temos

$$- \int dt_1 g_s^U(t - t_1, \bar{t}) [\Sigma_{ss}(\tau, \bar{t}) * G_{s,s}(\tau, \bar{t})], \text{ com } \tau = t_1 - t'$$

ou

$$- \int dt_1 g_s^U(t - t_1, \bar{t}) [\Sigma_{ss}(t_1 - t', \bar{t}) * G_{s,s}(t_1 - t', \bar{t})].$$

Agora, chamaremos o termo entre colchetes de uma outra função: $h(t_1 - t', \bar{t}) \equiv \Sigma_{ss}(t_1 - t', \bar{t}) * G_{s,s}(t_1 - t', \bar{t})$, então

$$- \int dt_1 g_s^U(t - t_1, \bar{t}) h(t_1 - t', \bar{t}),$$

e podemos proceder da mesma forma

$$\tau' = t - t_1 \rightarrow d\tau' = -dt_1 \quad (3.54)$$

$$\tau - \tau' = t_1 - t' = \tau - t + t_1 \Rightarrow \tau = t - t', \quad (3.55)$$

assim,

$$g_s^U(t - t', \bar{t}) * h(t - t', \bar{t}),$$

ou, substituindo $h(t - t', \bar{t})$

$$g_s^U(t - t', \bar{t}) * \Sigma_{ss}(t - t', \bar{t}) * G_{s,s}(t - t', \bar{t}).$$

Fazendo a transformada de fourrier

$$\begin{aligned} \mathfrak{F} \left[\int dt_1 \int dt_2 g_s^U(t - t_1, \bar{t}) \Sigma_{ss}(t_1 - t_2, \bar{t}) G_{s,s}(t_2 - t', \bar{t}) \right] &= \\ &= \mathfrak{F} \left[g_s^U(t - t', \bar{t}) * \Sigma_{ss}(t - t', \bar{t}) * G_{s,s}(t - t', \bar{t}) \right] \\ &= \mathfrak{F} \left[g_s^U(t - t', \bar{t}) \right] \mathfrak{F} \left[\Sigma_{ss}(t - t', \bar{t}) \right] \mathfrak{F} \left[G_{s,s}(t - t', \bar{t}) \right] \\ &= g_s^U(\omega, \bar{t}) \Sigma_{ss}(\omega, \bar{t}) G_{s,s}(\omega, \bar{t}). \end{aligned} \quad (3.56)$$

A próxima integral é

$$\begin{aligned} \int dt_1 \int dt_2 (t_1 - t_2) g_s^U(t - t_1, \bar{t}) \Sigma_{ss}(t_1 - t_2, \bar{t}) \frac{\partial}{\partial \bar{t}} G_{s,s}(t_2 - t', \bar{t}) &= \\ \int dt_1 g_s^U(t - t_1, \bar{t}) \int dt_2 (t_1 - t_2) \Sigma_{ss}(t_1 - t_2, \bar{t}) \frac{\partial}{\partial \bar{t}} G_{s,s}(t_2 - t', \bar{t}), \end{aligned}$$

chamando $(t_1 - t_2) \Sigma_{ss}(t_1 - t_2, \bar{t}) \equiv \Sigma'_{ss}(t_1 - t_2, \bar{t})$ e fazendo, novamente, as identificações (3.52) e (3.53), de forma análoga a feita no termo anterior, podemos escrever

$$- \int dt_1 g_s^U(t - t_1, \bar{t}) \left[\Sigma'_{ss}(t_1 - t', \bar{t}) * \frac{\partial}{\partial \bar{t}} G_{s,s}(t_1 - t', \bar{t}) \right],$$

e usando as mesmas identificações de (3.54) e (3.55) escrevemos

$$g_s^U(t - t', \bar{t}) * \Sigma'_{ss}(t - t', \bar{t}) * \frac{\partial}{\partial \bar{t}} G_{s,s}(t - t', \bar{t}).$$

A transformada de Fourier da convolução acima é

$$\begin{aligned}
& \mathfrak{S} \left[g_s^U(t-t', \bar{t}) * \Sigma'_{ss}(t-t', \bar{t}) * \frac{\partial}{\partial \bar{t}} G_{s,s}(t-t', \bar{t}) \right] \\
&= \mathfrak{S} \left[g_s^U(t-t', \bar{t}) \right] \mathfrak{S} \left[\Sigma'_{ss}(t-t', \bar{t}) \right] \mathfrak{S} \left[\frac{\partial}{\partial \bar{t}} G_{s,s}(t-t', \bar{t}) \right].
\end{aligned} \tag{3.57}$$

Vamos mostrar explicitamente o cálculo de

$$\begin{aligned}
\mathfrak{S} \left[\Sigma'_{ss}(t-t', \bar{t}) \right] &= \mathfrak{S} \left[(t-t') \Sigma_{ss}(t-t', \bar{t}) \right] \\
&= \int_{-\infty}^{+\infty} d(t-t') \exp \left[i\hbar\omega(t-t') \right] (t-t') \Sigma_{ss}(t-t', \bar{t}) \\
&= -i\hbar \frac{\partial}{\partial \omega} \int_{-\infty}^{+\infty} d(t-t') \exp \left[i\hbar\omega(t-t') \right] \Sigma_{ss}(t-t', \bar{t}) \\
&= -i\hbar \frac{\partial}{\partial \omega} \Sigma_{ss}(\omega, \bar{t})
\end{aligned} \tag{3.58}$$

Substituindo (3.58) em (3.57) e realizando a transformada de Fourier dos outros termos, escrevemos

$$-i\hbar \left[g_s^U(\omega, \bar{t}) \frac{\partial}{\partial \omega} \Sigma_{ss}(\omega, \bar{t}) \frac{\partial}{\partial \bar{t}} G_{s,s}(\omega, \bar{t}) \right]. \tag{3.59}$$

De forma análoga podemos escrever

$$\begin{aligned}
\mathfrak{S} \left[\int dt_1 \int dt_2 (t-t_1) g_s^U(t-t_1, \bar{t}) \Sigma_{ss}(t_1-t_2, \bar{t}) \frac{\partial}{\partial \bar{t}} G_{s,s}(t_2-t', \bar{t}) \right] &= \\
&= -i\hbar \frac{\partial}{\partial \omega} g_s^U(\omega, \bar{t}) \Sigma_{ss}(\omega, \bar{t}) \frac{\partial}{\partial \bar{t}} G_{s,s}(\omega, \bar{t})
\end{aligned} \tag{3.60}$$

$$\begin{aligned}
\mathfrak{S} \left[\int dt_1 \int dt_2 (t_1-t_2) \frac{\partial}{\partial \bar{t}} g_s^U(t-t_1, \bar{t}) \Sigma_{ss}(t_1-t_2, \bar{t}) G_{s,s}(t_2-t', \bar{t}) \right] &= \\
&= -i\hbar \frac{\partial}{\partial \bar{t}} g_s^U(\omega, \bar{t}) \frac{\partial}{\partial \omega} \Sigma_{ss}(\omega, \bar{t}) G_{s,s}(\omega, \bar{t})
\end{aligned} \tag{3.61}$$

$$\begin{aligned}
\mathfrak{S} \left[\int dt_1 \int dt_2 (t_2-t') \frac{\partial}{\partial \bar{t}} g_s^U(t-t_1, \bar{t}) \Sigma_{ss}(t_1-t_2, \bar{t}) G_{s,s}(t_2-t', \bar{t}) \right] &= \\
&= -i\hbar \frac{\partial}{\partial \bar{t}} g_s^U(\omega, \bar{t}) \Sigma_{ss}(\omega, \bar{t}) \frac{\partial}{\partial \omega} G_{s,s}(\omega, \bar{t})
\end{aligned} \tag{3.62}$$

$$\begin{aligned}
& \Im \left[\int dt_1 \int dt_2 (t_1 - t) g_s^U(t - t_1, \bar{t}) \frac{\partial}{\partial \bar{t}} \Sigma_{ss}(t_1 - t_2, \bar{t}) G_{s,s}(t_2 - t', \bar{t}) \right] = \\
& = i\hbar \frac{\partial}{\partial \omega} g_s^U(\omega \bar{t}) \frac{\partial}{\partial \bar{t}} \Sigma_{ss}(\omega, \bar{t}) G_{ss}(\omega, \bar{t}) \quad (3.63)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \Im \left[\int dt_1 \int dt_2 (t_2 - t') g_s^U(t - t_1, \bar{t}) \frac{\partial}{\partial \bar{t}} \Sigma_{ss}(t_1 - t_2, \bar{t}) G_{s,s}(t_2 - t', \bar{t}) \right] = \\
& = -i\hbar g_s^U(\omega, \bar{t}) \frac{\partial}{\partial \bar{t}} \Sigma_{ss}(\omega, \bar{t}) \frac{\partial}{\partial \omega} G_{ss}(\omega, \bar{t}) \quad (3.64)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \Im \left[\int dt_1 \int dt_2 (t_1 - t_2) g_s^U(t - t_1, \bar{t}) \times \right. \\
& \times \left. \left[\dot{V}_{k\alpha}^*(\bar{t}) V_{k\alpha}(\bar{t}) - V_{k\alpha}^*(\bar{t}) \dot{V}_{k\alpha}(\bar{t}) \right] g_{k\alpha s}(t_1 - t_2) G_{s,s}(t_2 - t', \bar{t}) \right] = \\
& = -i\hbar g_s^U(\omega, \bar{t}) \left[\dot{V}_{k\alpha}^*(\bar{t}) V_{k\alpha}(\bar{t}) - V_{k\alpha}^*(\bar{t}) \dot{V}_{k\alpha}(\bar{t}) \right] g_{k\alpha s}(\omega) G_{s,s}(\omega, \bar{t}) \\
& = -i\hbar g_s^U(\omega, \bar{t}) S^{(1)}(\omega, \bar{t}) G_{s,s}(\omega, \bar{t}), \quad (3.65)
\end{aligned}$$

ou seja, definimos: $S^{(1)}(\omega, \bar{t}) \equiv \dot{V}_{k\alpha}^*(\bar{t}) V_{k\alpha}(\bar{t}) - V_{k\alpha}^*(\bar{t}) \dot{V}_{k\alpha}(\bar{t})$.

Finalmente, podemos substituir esses resultados na equação (3.46) e assim teremos sua transformada de Fourier:

$$\begin{aligned}
G_{s,s}(\omega, \bar{t}) &= g_s^U(\omega, \bar{t}) + g_s^U(\omega, \bar{t}) \Sigma_{ss}(\omega, \bar{t}) G_{s,s}(\omega, \bar{t}) - \\
& - \frac{1}{2} \left\{ -i\hbar \left[g_s^U(\omega, \bar{t}) \frac{\partial}{\partial \omega} \Sigma_{ss}(\omega, \bar{t}) + \frac{\partial}{\partial \omega} g_s^U(\omega, \bar{t}) \Sigma_{ss}(\omega, \bar{t}) \right] \frac{\partial}{\partial \bar{t}} G_{s,s}(\omega, \bar{t}) \right\} + \\
& + \frac{1}{2} \left\{ -i\hbar \frac{\partial}{\partial \bar{t}} g_s^U(\omega, \bar{t}) \left[\frac{\partial}{\partial \omega} \Sigma_{ss}(\omega, \bar{t}) G_{s,s}(\omega, \bar{t}) + \Sigma_{ss}(\omega, \bar{t}) \frac{\partial}{\partial \omega} G_{s,s}(\omega, \bar{t}) \right] \right\} + \\
& + \frac{1}{2} \left[i\hbar \frac{\partial}{\partial \omega} g_s^U(\omega, \bar{t}) \frac{\partial}{\partial \bar{t}} \Sigma_{ss}(\omega, \bar{t}) G_{s,s}(\omega, \bar{t}) \right] - \\
& - \frac{1}{2} \left[-i\hbar g_s^U(\omega, \bar{t}) \frac{\partial}{\partial \bar{t}} \Sigma_{ss}(\omega, \bar{t}) \frac{\partial}{\partial \omega} G_{s,s}(\omega, \bar{t}) \right] + \\
& + \frac{1}{2} \left[-i\hbar g_s^U(\omega, \bar{t}) S^{(1)}(\omega, \bar{t}) G_{s,s}(\omega, \bar{t}) \right]. \quad (3.66)
\end{aligned}$$

Observe que alguns termos ainda podem ser simplificados

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial \omega} [g_s^U(\omega, \bar{t}) \Sigma_{ss}(\omega, \bar{t})] &= g_s^U(\omega, \bar{t}) \frac{\partial}{\partial \omega} \Sigma_{ss}(\omega, \bar{t}) + \frac{\partial}{\partial \omega} g_s^U(\omega, \bar{t}) \Sigma_{ss}(\omega, \bar{t}) \\ \frac{\partial}{\partial \omega} [\Sigma_{ss}(\omega, \bar{t}) G_{s,s}(\omega, \bar{t})] &= \frac{\partial}{\partial \omega} \Sigma_{ss}(\omega, \bar{t}) G_{s,s}(\omega, \bar{t}) + \Sigma_{ss}(\omega, \bar{t}) \frac{\partial}{\partial \omega} G_{s,s}(\omega, \bar{t}),\end{aligned}$$

assim

$$\begin{aligned}G_{s,s}(\omega, \bar{t}) &= g_s^U(\omega, \bar{t}) + g_s^U(\omega, \bar{t}) \Sigma_{ss}(\omega, \bar{t}) G_{s,s}(\omega, \bar{t}) + \\ &+ \frac{1}{2} i\hbar \frac{\partial}{\partial \omega} [g_s^U(\omega, \bar{t}) \Sigma_{ss}(\omega, \bar{t})] \frac{\partial}{\partial \bar{t}} G_{s,s}(\omega, \bar{t}) - \\ &- \frac{1}{2} i\hbar \frac{\partial}{\partial \bar{t}} g_s^U(\omega, \bar{t}) \frac{\partial}{\partial \omega} [\Sigma_{ss}(\omega, \bar{t}) G_{s,s}(\omega, \bar{t})] + \\ &+ \frac{1}{2} i\hbar \frac{\partial}{\partial \omega} g_s^U(\omega, \bar{t}) \frac{\partial}{\partial \bar{t}} \Sigma_{ss}(\omega, \bar{t}) G_{s,s}(\omega, \bar{t}) - \\ &- \frac{1}{2} i\hbar g_s^U(\omega, \bar{t}) \frac{\partial}{\partial \bar{t}} \Sigma_{ss}(\omega, \bar{t}) \frac{\partial}{\partial \omega} G_{s,s}(\omega, \bar{t}) - \\ &- \frac{1}{2} i\hbar g_s^U(\omega, \bar{t}) S^{(1)}(\omega, \bar{t}) G_{s,s}(\omega, \bar{t}).\end{aligned}\quad (3.67)$$

Podemos expressar o resultado na ordem linear nas variáveis lentas, formalmente, escrevemos

$$g_s^U(\omega, \bar{t}) = g_s^{U(0)}(\omega, \bar{t}) + g_s^{U(1)}(\omega, \bar{t}), \quad (3.68)$$

$$G_{s,s}(\omega, \bar{t}) = G_{s,s}^{(0)}(\omega, \bar{t}) + G_{s,s}^{(1)}(\omega, \bar{t}). \quad (3.69)$$

Então, usando (3.68) e (3.69) e desprezando termos de segunda ordem, escrevemos

$$\begin{aligned}G_{s,s}(\omega, \bar{t}) &= g_s^{U(0)}(\omega, \bar{t}) + g_s^{U(0)}(\omega, \bar{t}) \Sigma_{ss}(\omega, \bar{t}) G_{s,s}^{(0)}(\omega, \bar{t}) + \\ &+ g_s^{U(1)}(\omega, \bar{t}) + g_s^{U(0)}(\omega, \bar{t}) \Sigma_{ss}(\omega, \bar{t}) G_{s,s}^{(1)}(\omega, \bar{t}) + \\ &+ g_s^{U(1)}(\omega, \bar{t}) \Sigma_{ss}(\omega, \bar{t}) G_{s,s}^{(0)}(\omega, \bar{t}) - \\ &- \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial g_s^{U(0)}}{\partial \bar{t}}(\omega, \bar{t}) \frac{\partial}{\partial \omega} (\Sigma_{ss}(\omega, \bar{t}) G_{s,s}^{(0)}(\omega, \bar{t})) + \\ &+ \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial \omega} (g_s^{U(0)}(\omega, \bar{t}) \Sigma_{ss}(\omega, \bar{t})) \frac{\partial G_{s,s}^{(0)}}{\partial \bar{t}}(\omega, \bar{t}) + \\ &+ \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial g_s^{U(0)}}{\partial \omega}(\omega, \bar{t}) \frac{\partial \Sigma_{ss}}{\partial \bar{t}}(\omega, \bar{t}) G_{s,s}^{(0)}(\omega, \bar{t}) -\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& - \frac{i\hbar}{2} g_s^{U(0)}(\omega, \bar{t}) \frac{\partial \Sigma_{ss}}{\partial \bar{t}}(\omega, \bar{t}) \frac{\partial G_{s,s}^{(0)}}{\partial \omega}(\omega, \bar{t}) - \\
& - \frac{i\hbar}{2} g_s^{U(0)}(\omega, \bar{t}) S^{(1)}(\omega, \bar{t}) G_{s,s}^{(0)}(\omega, \bar{t}). \tag{3.70}
\end{aligned}$$

Da equação (3.70) podemos separar os termos ordem zero, que são termos de equilíbrio, dos termos de ordem um, que representam a correlação de primeira ordem na variável lenta:

$$G_{s,s}^{(0)}(\omega, \bar{t}) = g_s^{U(0)}(\omega, \bar{t}) + g_s^{U(0)}(\omega, \bar{t}) \Sigma_{ss}(\omega, \bar{t}) G_{s,s}^{(0)}(\omega, \bar{t}) \tag{3.71}$$

e

$$\begin{aligned}
G_{s,s}^{(1)}(\omega, \bar{t}) &= g_s^{U(1)}(\omega, \bar{t}) + g_s^{U(0)}(\omega, \bar{t}) \Sigma_{ss}(\omega, \bar{t}) G_{s,s}^{(1)}(\omega, \bar{t}) + \\
&+ g_s^{U(1)}(\omega, \bar{t}) \Sigma_{ss}(\omega, \bar{t}) G_{s,s}^{(0)}(\omega, \bar{t}) - \\
&- \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial g_s^{U(0)}}{\partial \bar{t}}(\omega, \bar{t}) \frac{\partial}{\partial \omega} (\Sigma_{ss}(\omega, \bar{t}) G_{ss}^{(0)}(\omega, \bar{t})) + \\
&+ \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial \omega} (g_s^{U(0)}(\omega, \bar{t}) \Sigma_{ss}(\omega, \bar{t})) \frac{\partial G_{ss}^{(0)}}{\partial \bar{t}}(\omega, \bar{t}) + \\
&+ \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial g_s^{U(0)}}{\partial \omega}(\omega, \bar{t}) \frac{\partial \Sigma_s}{\partial \bar{t}}(\omega, \bar{t}) G_{s,s}^{(0)}(\omega, \bar{t}) - \\
&- \frac{i\hbar}{2} g_s^{U(0)}(\omega, \bar{t}) \frac{\partial \Sigma_{ss}}{\partial \bar{t}}(\omega, \bar{t}) \frac{\partial G_{s,s}^{(0)}}{\partial \omega}(\omega, \bar{t}) - \\
&- \frac{i\hbar}{2} g_s^{U(0)}(\omega, \bar{t}) S^{(1)}(\omega, \bar{t}) G_{s,s}^{(0)}(\omega, \bar{t}), \tag{3.72}
\end{aligned}$$

onde $S^{(1)}(\omega, \bar{t}) = \sum_{k\alpha} [\dot{V}_{k\alpha}^* V_{k\alpha} - \dot{V}_{k\alpha} V_{k\alpha}^*]$ e esse termo surge da derivada temporal de Σ_{ss} , definido através da equação (3.37).

Com essas equações podemos calcular as componentes $G_{s,s}^{(0)r(a)}$, $G_{s,s}^{(0)<}$, $G_{s,s}^{(1)r(a)}$ e $G_{s,s}^{(1)<}$ definidas no capítulo 2. Elas serão necessárias para calcular as grandezas físicas interessantes do problema.

3.4.2 Função de Green de Ordem Zero

Primeiro vamos calcular as componentes de ordem zero, ou seja, componentes de equilíbrio; resolvendo a equação (3.31), obtemos

$$g_s^{U(0)}(\omega, \bar{t}) = \frac{1}{\omega - \epsilon_s(\bar{t}) - U \langle n_{\bar{s}}^{(0)}(\bar{t}) \rangle};$$

[observe que essa função está relacionada com o poço, pois envolve a energia $\epsilon_s(\bar{t})$] e resolvendo a equação (3.32), obtemos

$$g_{k\alpha s}(\omega, \bar{t}) = \frac{1}{\omega - \epsilon_{k\alpha s}}$$

[observe que essa função está relacionada com os contatos, pois envolve a energia $\epsilon_{k\alpha s}$]. E as componentes avançada e retardada são definidas a menos de uma constante imaginária, δ , infinitesimalmente pequena. Assim,

$$g_s^{U(0)r(a)}(\omega, \bar{t}) = \frac{1}{\omega - \epsilon_s(\bar{t}) - U \langle n_s^{(0)}(\bar{t}) \rangle \pm i\delta} \quad (3.73)$$

$$g_{k\alpha s}^{(0)r(a)}(\omega, \bar{t}) = \frac{1}{\omega - \epsilon_{k\alpha s} \pm i\delta}. \quad (3.74)$$

Outra forma de escrever a solução da equação (3.73) é a seguinte:

$$g_s^{U(0)r(a)}(\omega, \bar{t}) = P \left(\frac{1}{\omega - \epsilon_s(\bar{t}) - U \langle n_s^{(0)}(\bar{t}) \rangle} \right) \mp i\pi\delta(\omega - \epsilon_s(\bar{t}) - U \langle n_s^{(0)}(\bar{t}) \rangle), \quad (3.75)$$

onde P é a parte principal da função entre parênteses. Com a forma de escrever acima e munido do teorema de flutuação-dissipação:

$$h^<(\omega, t) = f(\omega)[h^a(\omega, t) - h^r(\omega, t)], \quad (3.76)$$

onde $h(\omega, t)$ é uma função de Green qualquer e $f(\omega) = [e^{\hbar\omega/k_B T} + 1]^{-1}$ é a função de Fermi-Dirac, podemos calcular $g_s^{U(0)<}(\omega, \bar{t})$:

$$g_s^{U(0)<}(\omega, t) = 2\pi i f(\omega) \delta(\omega - \epsilon_s(\bar{t}) - U \langle n_s^{(0)}(\bar{t}) \rangle). \quad (3.77)$$

Essas expressões serão necessárias para futuros cálculos, mas antes de prosseguir é interessante fazer algumas considerações referentes as auto-energias “parciais”,

$$\Sigma_{\alpha s}(\omega, \bar{t}) \equiv \sum_k V_{k\alpha}^*(\bar{t}) g_{k\alpha s}(\omega, \bar{t}) V_{k\alpha}(\bar{t}), \quad (3.78)$$

relacionadas a auto-energia por $\Sigma_{ss} = \sum_{\alpha} \Sigma_{\alpha s}$.

Assumindo que o acoplamento do ponto com os reservatórios seja fraco, $\Sigma_{k\alpha}$ pode ser escrita em termos da amplitudes de decaimento Γ_{α} da seguinte forma

$$\Sigma_{\alpha s}^{r(a)}(\omega, \bar{t}) = \mp i \frac{\Gamma_{\alpha}(\bar{t})}{2}. \quad (3.79)$$

E, através do teorema flutuação-dissipação [equação (3.76)], escrevemos

$$\Sigma_{\alpha s}^<(\omega, \bar{t}) = if(\omega)\Gamma_{\alpha}(\bar{t}), \quad (3.80)$$

onde $\Gamma_{\alpha}(\bar{t}) = 2\pi|V_{\alpha}(\bar{t})|^2\rho_{\alpha}$, sendo ρ_{α} a densidade eletrônica de estados no nível de Fermi no fio α .

Agora, da equação (3.71) podemos escrever, usando as regras de Langreth descritas no capítulo 2,

$$G_{s,s}^{(0)r(a)}(\omega, \bar{t}) = g_s^{U(0)r(a)}(\omega, \bar{t}) + g_s^{U(0)r(a)}(\omega, \bar{t})\Sigma_{\alpha s}^{r(a)}(\omega, \bar{t})G_{s,s}^{(0)r(a)}(\omega, \bar{t}), \quad (3.81)$$

então

$$G_{s,s}^{(0)r(a)}(\omega, \bar{t}) = \frac{g_s^{U(0)r(a)}}{1 - g_s^{U(0)r(a)}\Sigma_{ss}^{r(a)}},$$

e, usando (3.73) e (3.79) escrevemos

$$G_{s,s}^{(0)r(a)}(\omega, \bar{t}) = \frac{\frac{1}{\omega - \epsilon_s(\bar{t}) - U\langle n_s^{(0)}(\bar{t}) \rangle}}{1 - \frac{1}{\omega - \epsilon_s(\bar{t}) - U\langle n_s^{(0)}(\bar{t}) \rangle}\Sigma_{ss}^{r(a)}(\bar{t})}$$

$$G_{s,s}^{(0)r(a)}(\omega, \bar{t}) = \frac{1}{(\omega - \epsilon_s - U\langle n_s^{(0)}(\bar{t}) \rangle) \pm i\frac{\Gamma_{\alpha}(\bar{t})}{2} \pm i\delta},$$

onde podemos desprezar $i\delta$ em relação a $i\frac{\Gamma_{\alpha}(\bar{t})}{2}$. E, então,

$$G_{s,s}^{(0)r(a)}(\omega, \bar{t}) = \frac{1}{(\omega - \epsilon_s - U\langle n_s^{(0)}(\bar{t}) \rangle) \pm i\frac{\Gamma_{\alpha}(\bar{t})}{2}}. \quad (3.82)$$

Usando novamente o teorema dissipação-flutuação escrevemos $G_{s,s}^{(0)<}$:

$$G_{s,s}^{(0)<}(\omega, \bar{t}) = f(\omega) (G_{s,s}^{(0)a}(\omega, \bar{t}) - G_{s,s}^{(0)r}(\omega, \bar{t})) \quad (3.83)$$

$$\begin{aligned} G_{s,s}^{(0)<}(\omega) &= f(\omega) \left(\frac{1}{\omega - \epsilon_s - U\langle n_s^{(0)} \rangle - i\frac{\Gamma_{\alpha}}{2}} - \frac{1}{\omega - \epsilon_s - U\langle n_s^{(0)} \rangle + i\frac{\Gamma_{\alpha}}{2}} \right) \\ &= f(\omega) \left(\frac{i\Gamma_{\alpha}}{(\omega - \epsilon_s - U\langle n_s^{(0)} \rangle)^2 + \frac{\Gamma_{\alpha}^2}{4}} \right), \end{aligned} \quad (3.84)$$

[observe que nesse ponto abandonamos a dependência temporal pois estamos tratando das contribuições de equilíbrio], onde $\bar{s} = -s$, portanto temos acima duas equações envolvendo s e \bar{s} .

Neste ponto estamos preparados para calcular o número de ocupação médio de ordem zero através da equação (3.5) [isso será calculado mais adiante].

3.4.3 Função de Green de Primeira Ordem

Agora vamos trabalhar com as componentes de primeira ordem, usando a equação (3.72). Com a reparametrização do tempo que fizemos podemos simplificar as componentes retardadas e avançadas de $g_s^{U(1)}$. Escrevemos a solução para a componente retardada (o mesmo pode ser pensado para avançada):

$$g_{0,s}^r(t-t') = -\frac{i}{\hbar} \theta(t-t') \exp^{-\frac{i}{\hbar} \int_{t'}^t dt_1 \tilde{\epsilon}_s(t_1)}, \quad (3.85)$$

onde $\tilde{\epsilon}_s(t_1) \equiv \epsilon_s(t_1) + U \langle n_{\bar{s}}(t_1) \rangle$ expandindo $\tilde{\epsilon}_s(t_1)$ em torno do tempo médio $\bar{t} = \frac{t+t'}{2}$, ou seja, $\tilde{\epsilon}_s(t_1) = \tilde{\epsilon}_s(\bar{t}) + \dot{\tilde{\epsilon}}_s(\bar{t})(t_1 - \bar{t})$; e a integral fica

$$\begin{aligned} \int_{t'}^t dt_1 \tilde{\epsilon}_s(t_1) &= \int_{t'}^t dt_1 [\tilde{\epsilon}_s(\bar{t}) + \dot{\tilde{\epsilon}}_s(\bar{t})(t_1 - \bar{t})] \\ &= t_1 \tilde{\epsilon}_s(\bar{t}) + \frac{(t_1)^2}{2} \dot{\tilde{\epsilon}}_s(\bar{t}) - \bar{t} t_1 \dot{\tilde{\epsilon}}_s(\bar{t}) + O(\ddot{\tilde{\epsilon}}) \\ &= t_1 \tilde{\epsilon}_s(\bar{t}) + \left(\frac{t^2}{2} - \frac{(t')^2}{2} \right) \dot{\tilde{\epsilon}}_s(\bar{t}) - \left(\frac{t}{2} + \frac{t'}{2}(t-t') \right) \dot{\tilde{\epsilon}}_s(\bar{t}) + O(\ddot{\tilde{\epsilon}}) \\ &= t_1 \tilde{\epsilon}_s(\bar{t}) + \left(\frac{t^2}{2} - \frac{(t')^2}{2} \right) \dot{\tilde{\epsilon}}_s(\bar{t}) - \left(\frac{t^2}{2} + \frac{t't}{2} - \frac{t't}{2} - \frac{(t')^2}{2} \right) \dot{\tilde{\epsilon}}_s(\bar{t}) + O(\ddot{\tilde{\epsilon}}) \\ &= t_1 \tilde{\epsilon}_s(\bar{t}) + \left(\frac{t^2}{2} - \frac{(t')^2}{2} \right) \dot{\tilde{\epsilon}}_s(\bar{t}) + \left(-\frac{t^2}{2} + \frac{(t')^2}{2} \right) \dot{\tilde{\epsilon}}_s(\bar{t}) + O(\ddot{\tilde{\epsilon}}) \Big|_{t_1 \sim \bar{t}} \\ &= \bar{t} \tilde{\epsilon}_s(\bar{t}) + O(\ddot{\tilde{\epsilon}}), \end{aligned}$$

observe que temos um termo de ordem zero na derivada e termos de ordem dois e ordens maiores, o termo de primeira ordem na derivada é cancelado quando fazemos a integral. Por esse motivo podemos afirmar que

$$g_s^{U(1)r(a)}(t-t', \bar{t}) = 0 \Rightarrow g_s^{U(1)r(a)}(\omega, \bar{t}) = 0. \quad (3.86)$$

O mesmo cálculo pode ser feito para $g_s^{U(1)<}(\omega, \bar{t})$ e o mesmo resultado é encontrado. Portanto também podemos afirmar que

$$g_s^{U(1)<}(t-t', \bar{t}) = 0 \Rightarrow g_s^{U(1)<}(\omega, \bar{t}) = 0. \quad (3.87)$$

Da equação (3.72) escrevemos as componentes retardada e avançada usando as regras de Langret. De forma resumida, elas estão escritas no quadro abaixo:

Tendo uma função de Green composta de três funções de Green distintas:

$$D = \int_C ABC$$

escrevemos, através das regras de Langret

$$D^< = \int_t A^r B^r C^< + A^r B^< C^a + A^< B^a C^a]$$

e

$$D^{r(a)} = \int_t A^{r(a)} B^{r(a)} C^{r(a)}.$$

Assim, usando as regras descritas acima, escrevemos

$$\begin{aligned} G_{s,s}^{(1)r(a)}(\omega, \bar{t}) &= g_s^{U(1)r(a)}(\omega, \bar{t}) + g_s^{U(0)r(a)}(\omega, \bar{t}) \Sigma_{ss}(\omega, \bar{t}) G_{s,s}^{(1)r(a)}(\omega, \bar{t}) + \\ &+ g_s^{U(1)r(a)}(\omega, \bar{t}) \Sigma_{ss}(\omega, \bar{t}) G_{s,s}^{(0)r(a)}(\omega, \bar{t}) - \\ &- \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial g_s^{U(0)r(a)}}{\partial \bar{t}}(\omega, \bar{t}) \frac{\partial}{\partial \omega} [\Sigma_{ss}(\omega, \bar{t}) G_{ss}^{(0)r(a)}(\omega, \bar{t})] + \\ &+ \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial \omega} [g_s^{U(0)r(a)}(\omega, \bar{t}) \Sigma_{ss}(\omega, \bar{t})] \frac{\partial G_{ss}^{(0)r(a)}}{\partial \bar{t}}(\omega, \bar{t}) + \\ &+ \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial g_s^{U(0)r(a)}}{\partial \omega}(\omega, \bar{t}) \frac{\partial \Sigma_s}{\partial \bar{t}}(\omega, \bar{t}) G_{s,s}^{(0)r(a)}(\omega, \bar{t}) - \\ &- \frac{i\hbar}{2} g_s^{U(0)r(a)}(\omega, \bar{t}) \frac{\partial \Sigma_{ss}}{\partial \bar{t}}(\omega, \bar{t}) \frac{\partial G_{s,s}^{(0)r(a)}}{\partial \omega}(\omega, \bar{t}) - \\ &- \frac{i\hbar}{2} g_s^{U(0)r(a)}(\omega, \bar{t}) S^{(1)r(a)}(\omega, \bar{t}) G_{s,s}^{(0)}(\omega, \bar{t}), \end{aligned} \quad (3.88)$$

fazendo a simplificação (3.86) e usando $V_{k\alpha}$ real, escrevemos

$$\begin{aligned} G_{s,s}^{(1)r(a)}(\omega, \bar{t}) &= g_s^{U(0)r(a)}(\omega, \bar{t}) \Sigma_{\alpha s}(\omega, \bar{t}) G_{s,s}^{(1)r(a)}(\omega, \bar{t}) - \\ &- \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial g_s^{U(0)r(a)}}{\partial \bar{t}}(\omega, \bar{t}) \frac{\partial}{\partial \omega} [\Sigma_{\alpha s}(\omega, \bar{t}) G_{ss}^{(0)r(a)}(\omega, \bar{t})] + \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial \omega} [g_s^{U(0)r(a)}(\omega, \bar{t}) \Sigma_{\alpha s}(\omega, \bar{t})] \frac{\partial G_{ss}^{(0)r(a)}}{\partial \bar{t}}(\omega, \bar{t}) + \\
& + \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial g_s^{U(0)r(a)}}{\partial \omega}(\omega, \bar{t}) \frac{\partial \Sigma_{\alpha s}}{\partial \bar{t}}(\omega, \bar{t}) G_{s,s}^{(0)r(a)}(\omega, \bar{t}) - \\
& - \frac{i\hbar}{2} g_s^{U(0)r(a)}(\omega, \bar{t}) \frac{\partial \Sigma_{\alpha s}}{\partial \bar{t}}(\omega, \bar{t}) \frac{\partial G_{s,s}^{(0)r(a)}}{\partial \omega}(\omega, \bar{t}),
\end{aligned}$$

ou

$$\begin{aligned}
G_{s,s}^{(1)r(a)}(\omega, \bar{t}) & = \frac{1}{1 - g_s^{U(0)r(a)}(\omega, \bar{t}) \Sigma_{\alpha s}^{r(a)}(\omega, \bar{t})} \times \\
& \times \left[-\frac{i\hbar}{2} \frac{\partial g_s^{U(0)r(a)}}{\partial \bar{t}}(\omega, \bar{t}) \frac{\partial}{\partial \omega} [\Sigma_{\alpha s}^{r(a)}(\omega, \bar{t}) G_{ss}^{(0)r(a)}(\omega, \bar{t})] + \right. \\
& + \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial \omega} [g_s^{U(0)r(a)}(\omega, \bar{t}) \Sigma_{\alpha s}^{r(a)}(\omega, \bar{t})] \frac{\partial G_{ss}^{(0)r(a)}}{\partial \bar{t}}(\omega, \bar{t}) + \\
& + \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial g_s^{U(0)r(a)}}{\partial \omega}(\omega, \bar{t}) \frac{\partial \Sigma_{\alpha s}^{r(a)}}{\partial \bar{t}}(\omega, \bar{t}) G_{s,s}^{(0)r(a)}(\omega, \bar{t}) - \\
& \left. - \frac{i\hbar}{2} g_s^{U(0)r(a)}(\omega, \bar{t}) \frac{\partial \Sigma_{\alpha s}^{r(a)}}{\partial \bar{t}}(\omega, \bar{t}) \frac{\partial}{\partial \omega} G_{s,s}^{(0)r(a)}(\omega, \bar{t}) \right]. \quad (3.89)
\end{aligned}$$

Para $G_{s,s}^{(1)<}$ escrevemos [ainda sem usar as simplificações (3.86) e (3.87), mas já usando que $V_{k\alpha}$ é real]

$$\begin{aligned}
G_{s,s}^{(1)<}(\omega, \bar{t}) & = g_s^{U(1)<}(\omega, \bar{t}) g_s^{U(0)r}(\omega, \bar{t}) \Sigma_{\alpha s}^r(\omega, \bar{t}) G_{s,s}^{(1)<}(\omega, \bar{t}) + \\
& + g_s^{U(0)r}(\omega, \bar{t}) \Sigma_{\alpha s}^{<}(\omega, \bar{t}) G_{s,s}^{(1)a}(\omega, \bar{t}) + \\
& + g_s^{U(0)<}(\omega, \bar{t}) \Sigma_{\alpha s}^a(\omega, \bar{t}) G_{s,s}^{(1)a}(\omega, \bar{t}) + \\
& + g_s^{U(1)r}(\omega, \bar{t}) \Sigma_{\alpha s}^r(\omega, \bar{t}) G_{s,s}^{(0)<}(\omega, \bar{t}) + \\
& + g_s^{U(1)<}(\omega, \bar{t}) \Sigma_{\alpha s}^{<}(\omega, \bar{t}) G_{s,s}^{(0)a}(\omega, \bar{t}) + \\
& + g_s^{U(1)<}(\omega, \bar{t}) \Sigma_{\alpha s}^a(\omega, \bar{t}) G_{s,s}^{(0)a}(\omega, \bar{t}) - \\
& - \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial \bar{t}} g_s^{U(0)r}(\omega, \bar{t}) \frac{\partial}{\partial \omega} [\Sigma_{\alpha s}^r(\omega, \bar{t}) G_{s,s}^{(0)<}(\omega, \bar{t})] - \\
& - \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial \bar{t}} g_s^{U(0)r}(\omega, \bar{t}) \frac{\partial}{\partial \omega} [\Sigma_{\alpha s}^{<}(\omega, \bar{t}) G_{s,s}^{(0)a}(\omega, \bar{t})] - \\
& - \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial \bar{t}} g_s^{U(0)<}(\omega, \bar{t}) \frac{\partial}{\partial \omega} [\Sigma_{\alpha s}^a(\omega, \bar{t}) G_{s,s}^{(0)a}(\omega, \bar{t})] - \\
& + \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial \omega} [g_s^{U(0)r}(\omega, \bar{t}) \Sigma_{\alpha s}^r(\omega, \bar{t})] \frac{\partial}{\partial \bar{t}} G_{s,s}^{(0)<}(\omega, \bar{t}) + \\
& + \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial \omega} [g_s^{U(0)r}(\omega, \bar{t}) \Sigma_{\alpha s}^{<}(\omega, \bar{t})] \frac{\partial}{\partial \bar{t}} G_{s,s}^{(0)a}(\omega, \bar{t}) +
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial \omega} [g_s^{U(0)<}(\omega, \bar{t}) \Sigma_{\alpha s}^a(\omega, \bar{t})] \frac{\partial}{\partial \bar{t}} G_{s,s}^{(0)a}(\omega, \bar{t}) + \\
& + \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial \omega} g_s^{U(0)r}(\omega, \bar{t}) \frac{\partial}{\partial \bar{t}} \Sigma_{\alpha s}^r(\omega, \bar{t}) G_{s,s}^{(0)<}(\omega, \bar{t}) + \\
& + \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial \omega} g_s^{U(0)r}(\omega, \bar{t}) \frac{\partial}{\partial \bar{t}} \Sigma_{\alpha s}^{<}(\omega, \bar{t}) G_{s,s}^{(0)a}(\omega, \bar{t}) + \\
& + \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial \omega} g_s^{U(0)<}(\omega, \bar{t}) \frac{\partial}{\partial \bar{t}} \Sigma_{\alpha s}^a(\omega, \bar{t}) G_{s,s}^{(0)a}(\omega, \bar{t}) - \\
& - \frac{i\hbar}{2} g_s^{(U)(0)r}(\omega, \bar{t}) \frac{\partial}{\partial \bar{t}} \Sigma_{\alpha s}^r(\omega, \bar{t}) \frac{\partial}{\partial \omega} G_{s,s}^{(0)<}(\omega, \bar{t}) - \\
& - \frac{i\hbar}{2} g_s^{U(0)r}(\omega, \bar{t}) \frac{\partial}{\partial \bar{t}} \Sigma_{\alpha s}^{<}(\omega, \bar{t}) \frac{\partial}{\partial \omega} G_{s,s}^{(0)a}(\omega, \bar{t}) - \\
& - \frac{i\hbar}{2} g_s^{U(0)<}(\omega, \bar{t}) \frac{\partial}{\partial \bar{t}} \Sigma_{\alpha s}^a(\omega, \bar{t}) \frac{\partial}{\partial \omega} G_{s,s}^{(0)a}(\omega, \bar{t}).
\end{aligned}$$

Agora, usando (3.86) e (3.87),

$$\begin{aligned}
G_{s,s}^{(1)<}(\omega, \bar{t}) & = g_s^{U(0)r}(\omega, \bar{t}) \Sigma_{\alpha s}^r(\omega, \bar{t}) G_{s,s}^{(1)<}(\omega, \bar{t}) + \\
& + g_s^{U(0)r}(\omega, \bar{t}) \Sigma_{\alpha s}^{<}(\omega, \bar{t}) G_{s,s}^{(1)a}(\omega, \bar{t}) + \\
& + g_s^{U(0)<}(\omega, \bar{t}) \Sigma_{\alpha s}^a(\omega, \bar{t}) G_{s,s}^{(1)a}(\omega, \bar{t}) - \\
& - \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial \bar{t}} g_s^{U(0)r}(\omega, \bar{t}) \frac{\partial}{\partial \omega} [\Sigma_{\alpha s}^r(\omega, \bar{t}) G_{s,s}^{(0)<}(\omega, \bar{t})] - \\
& - \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial \bar{t}} g_s^{U(0)r}(\omega, \bar{t}) \frac{\partial}{\partial \omega} [\Sigma_{\alpha s}^{<}(\omega, \bar{t}) G_{s,s}^{(0)a}(\omega, \bar{t})] + \\
& - \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial \bar{t}} g_s^{U(0)<}(\omega, \bar{t}) \frac{\partial}{\partial \omega} [\Sigma_{\alpha s}^a(\omega, \bar{t}) G_{s,s}^{(0)a}(\omega, \bar{t})] + \\
& + \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial \omega} [g_s^{U(0)r}(\omega, \bar{t}) \Sigma_{\alpha s}^r(\omega, \bar{t})] \frac{\partial}{\partial \bar{t}} G_{s,s}^{(0)<}(\omega, \bar{t}) + \\
& + \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial \omega} [g_s^{U(0)r}(\omega, \bar{t}) \Sigma_{\alpha s}^{<}(\omega, \bar{t})] \frac{\partial}{\partial \bar{t}} G_{s,s}^{(0)a}(\omega, \bar{t}) + \\
& + \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial \omega} [g_s^{U(0)<}(\omega, \bar{t}) \Sigma_{\alpha s}^a(\omega, \bar{t})] \frac{\partial}{\partial \bar{t}} G_{s,s}^{(0)a}(\omega, \bar{t}) + \\
& + \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial \omega} g_s^{U(0)r}(\omega, \bar{t}) \frac{\partial}{\partial \bar{t}} \Sigma_{\alpha s}^r(\omega, \bar{t}) G_{s,s}^{(0)<}(\omega, \bar{t}) + \\
& + \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial \omega} g_s^{U(0)r}(\omega, \bar{t}) \frac{\partial}{\partial \bar{t}} \Sigma_{\alpha s}^{<}(\omega, \bar{t}) G_{s,s}^{(0)a}(\omega, \bar{t}) + \\
& + \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial \omega} g_s^{U(0)<}(\omega, \bar{t}) \frac{\partial}{\partial \bar{t}} \Sigma_{\alpha s}^a(\omega, \bar{t}) G_{s,s}^{(0)a}(\omega, \bar{t}) - \\
& - \frac{i\hbar}{2} g_s^{(U)(0)r}(\omega, \bar{t}) \frac{\partial}{\partial \bar{t}} \Sigma_{\alpha s}^r(\omega, \bar{t}) \frac{\partial}{\partial \omega} G_{s,s}^{(0)<}(\omega, \bar{t}) - \\
& - \frac{i\hbar}{2} g_s^{U(0)r}(\omega, \bar{t}) \frac{\partial}{\partial \bar{t}} \Sigma_{\alpha s}^{<}(\omega, \bar{t}) \frac{\partial}{\partial \omega} G_{s,s}^{(0)a}(\omega, \bar{t}) -
\end{aligned}$$

$$- \frac{i\hbar}{2} g_s^{U(0)<}(\omega, \bar{t}) \frac{\partial}{\partial \bar{t}} \Sigma_{\alpha s}^a(\omega, \bar{t}) \frac{\partial}{\partial \omega} G_{s,s}^{(0)a}(\omega, \bar{t}).$$

ou

$$\begin{aligned}
G_{s,s}^{(1)<}(\omega, \bar{t}) &= \frac{1}{1 - g_s^{U(0)r}(\omega, \bar{t}) \Sigma_{\alpha s}^r(\omega, \bar{t})} \times \\
&\times \left[g_s^{U(0)r}(\omega, \bar{t}) \Sigma_{\alpha s}^<(\omega, \bar{t}) G_{s,s}^{(1)a}(\omega, \bar{t}) + \right. \\
&+ g_s^{U(0)<}(\omega, \bar{t}) \Sigma_{\alpha s}^a(\omega, \bar{t}) G_{s,s}^{(1)a}(\omega, \bar{t}) - \\
&- \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial \bar{t}} g_s^{U(0)r}(\omega, \bar{t}) \frac{\partial}{\partial \omega} [\Sigma_{\alpha s}^r(\omega, \bar{t}) G_{s,s}^{(0)<}(\omega, \bar{t})] - \\
&- \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial \bar{t}} g_s^{U(0)r}(\omega, \bar{t}) \frac{\partial}{\partial \omega} [\Sigma_{\alpha s}^<(\omega, \bar{t}) G_{s,s}^{(0)a}(\omega, \bar{t})] - \\
&- \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial \bar{t}} g_s^{U(0)<}(\omega, \bar{t}) \frac{\partial}{\partial \omega} [\Sigma_{\alpha s}^a(\omega, \bar{t}) G_{s,s}^{(0)a}(\omega, \bar{t})] + \\
&+ \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial \omega} [g_s^{U(0)r}(\omega, \bar{t}) \Sigma_{\alpha s}^r(\omega, \bar{t})] \frac{\partial}{\partial \bar{t}} G_{s,s}^{(0)<}(\omega, \bar{t}) + \\
&+ \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial \omega} [g_s^{U(0)r}(\omega, \bar{t}) \Sigma_{\alpha s}^<(\omega, \bar{t})] \frac{\partial}{\partial \bar{t}} G_{s,s}^{(0)a}(\omega, \bar{t}) + \\
&+ \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial \omega} [g_s^{U(0)<}(\omega, \bar{t}) \Sigma_{\alpha s}^a(\omega, \bar{t})] \frac{\partial}{\partial \bar{t}} G_{s,s}^{(0)a}(\omega, \bar{t}) + \\
&+ \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial \omega} g_s^{U(0)r}(\omega, \bar{t}) \frac{\partial}{\partial \bar{t}} \Sigma_{\alpha s}^r(\omega, \bar{t}) G_{s,s}^{(0)<}(\omega, \bar{t}) + \\
&+ \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial \omega} g_s^{U(0)r}(\omega, \bar{t}) \frac{\partial}{\partial \bar{t}} \Sigma_{\alpha s}^<(\omega, \bar{t}) G_{s,s}^{(0)a}(\omega, \bar{t}) + \\
&+ \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial \omega} g_s^{U(0)<}(\omega, \bar{t}) \frac{\partial}{\partial \bar{t}} \Sigma_{\alpha s}^a(\omega, \bar{t}) G_{s,s}^{(0)a}(\omega, \bar{t}) - \\
&- \frac{i\hbar}{2} g_s^{(U)(0)r}(\omega, \bar{t}) \frac{\partial}{\partial \bar{t}} \Sigma_{\alpha s}^r(\omega, \bar{t}) \frac{\partial}{\partial \omega} G_{s,s}^{(0)<}(\omega, \bar{t}) - \\
&- \frac{i\hbar}{2} g_s^{U(0)r}(\omega, \bar{t}) \frac{\partial}{\partial \bar{t}} \Sigma_{\alpha s}^<(\omega, \bar{t}) \frac{\partial}{\partial \omega} G_{s,s}^{(0)a}(\omega, \bar{t}) - \\
&- \left. \frac{i\hbar}{2} g_s^{U(0)<}(\omega, \bar{t}) \frac{\partial}{\partial \bar{t}} \Sigma_{\alpha s}^a(\omega, \bar{t}) \frac{\partial}{\partial \omega} G_{s,s}^{(0)a}(\omega, \bar{t}) \right]. \quad (3.90)
\end{aligned}$$

Nosso principal objetivo é calcular a equação (3.90), mas para isso devemos, primeiramente, calcular a componente avançada de primeira ordem: $G_{s,s}^{(1)a}(\omega, \bar{t})$. Usando a (3.89), e os resultados obtidos na seção anterior, podemos escrever:

$$\begin{aligned}
G_{s,s}^{(1)a}(\omega, \bar{t}) &= \frac{-2\delta\Delta\Gamma_\alpha\Omega\hbar\sin(\Omega\bar{t} + \phi_\alpha)}{(\epsilon_0 + \epsilon_1 \cos(\Omega\bar{t}) + U \langle n_s^0 \rangle - \omega + i\delta)} \\
&\times \frac{1}{[2(\epsilon_0 + \epsilon_1 \cos(\Omega\bar{t}) + U \langle n_s^0 \rangle - \omega) + i(\Gamma_0 + \Delta\Gamma_\alpha \cos(\Omega\bar{t} + \phi_\alpha))]^2} \\
&\times \frac{1}{[-2i(\epsilon_0 + \epsilon_1 \cos(\Omega\bar{t}) + U \langle n_s^0 \rangle - \omega) + 2\delta + \Gamma_0 + \Delta\Gamma_\alpha \cos(\Omega\bar{t} + \phi_\alpha)]}.
\end{aligned} \tag{3.91}$$

Aqui, vamos fazer um definição que facilitará a escrita das equações:

$$a(\bar{t}) = \epsilon_s(\bar{t}) + U \langle n_s^0(\bar{t}) \rangle, \tag{3.92}$$

observe que a é uma função do tempo. Assim, reescrevendo a função de Green avançada com essa nova definição, temos

$$\begin{aligned}
G_{s,s}^{(1)a}(\omega, \bar{t}) &= \frac{-2\delta\Delta\Gamma_\alpha\Omega\hbar\sin(\Omega\bar{t} + \phi_\alpha)}{(a(\bar{t}) - \omega + i\delta) [2(a(\bar{t}) - \omega) + i(\Gamma_0 + \Delta\Gamma_\alpha \cos(\Omega\bar{t} + \phi_\alpha))]^2} \times \\
&\times \frac{1}{[-2i(a(\bar{t}) - \omega) + 2\delta + \Gamma_0 + \Delta\Gamma_\alpha \cos(\Omega\bar{t} + \phi_\alpha)]}.
\end{aligned} \tag{3.93}$$

No limite de $\delta \rightarrow 0$, essa equação é igual a zero. Isso torna-se claro pois a função acima é proporcional a δ , portanto no limite que $\delta \rightarrow 0$ toda a função $G_{s,s}^{(1)a}(\omega, \bar{t})$ tende a zero.

Agora podemos calcular $G_{s,s}^{(1)<}(\omega, \bar{t})$:

$$\begin{aligned}
G_{s,s}^{(1)<} &= g_s^{U(0)}(\omega, \bar{t}) \Sigma_{\alpha s}^r(\omega, \bar{t}) G_{s,s}^{(1)<}(\omega, \bar{t}) + \frac{\hbar}{2} \frac{\partial f}{\partial \omega} \frac{\Gamma_\alpha(\bar{t}) \partial_{\bar{t}}[a(\bar{t})]}{(\omega - a(\bar{t}) + i\delta)^2 (\omega - a(\bar{t}) - i\frac{\Gamma_\alpha(\bar{t})}{2})} - \\
&- \frac{\hbar}{4} i \frac{\partial f}{\partial \omega} \frac{\Gamma_\alpha^2(\bar{t}) \partial_{\bar{t}}[a(\bar{t})]}{(\omega - a(\bar{t}) + i\delta)^2 \left[(\omega - a(\bar{t}))^2 + \left(\frac{\Gamma_\alpha(\bar{t})}{2} \right)^2 \right]} - \frac{\hbar}{2} \pi i f \frac{\Gamma_\alpha(\bar{t}) \partial_{\bar{t}}[\delta(\omega - a(\bar{t}))]}{(\omega - a(\bar{t}) - i\frac{\Gamma_\alpha(\bar{t})}{2})^2} + \\
&+ \frac{\hbar}{8} \frac{if\Gamma_\alpha^3(\bar{t})\partial_{\bar{t}}[\Gamma_\alpha(\bar{t})]}{(\omega - a(\bar{t}) + i\delta)^2 \left[(\omega - a(\bar{t}))^2 + \left(\frac{\Gamma_\alpha(\bar{t})}{2} \right)^2 \right]} - \frac{\hbar}{4} \frac{if\partial_{\bar{t}}[\Gamma_\alpha(\bar{t})]}{(\omega - a(\bar{t}) + i\delta)^2 \left[(\omega - a(\bar{t}))^2 + \left(\frac{\Gamma_\alpha(\bar{t})}{2} \right)^2 \right]} + \\
&+ \frac{\hbar}{4} if \frac{\Gamma_\alpha(\bar{t}) \partial_{\bar{t}}[\Gamma_\alpha(\bar{t})]}{(\omega - a(\bar{t}) + i\delta)^2 (\omega - a(\bar{t}) - i\frac{\Gamma_\alpha(\bar{t})}{2})^2} - \frac{\hbar}{2} \frac{\partial f}{\partial \omega} \frac{\Gamma_\alpha(\bar{t}) \partial_{\bar{t}}[a(\bar{t})]}{(\omega - a(\bar{t}) + i\delta) (\omega - a(\bar{t}) - i\frac{\Gamma_\alpha(\bar{t})}{2})^2} - \\
&- \frac{\hbar}{4} i \frac{\partial f}{\partial \omega} \frac{\Gamma_\alpha(\bar{t}) \partial_{\bar{t}}[\Gamma_\alpha(\bar{t})]}{(\omega - a(\bar{t}) + i\delta) (\omega - a(\bar{t}) - i\frac{\Gamma_\alpha(\bar{t})}{2})^2} - \frac{\hbar}{4} \pi i \frac{\partial f}{\partial \omega} \frac{\Gamma_\alpha(\bar{t}) \partial_{\bar{t}}[a(\bar{t})] \delta(\omega - a(\bar{t}))}{(\omega - a(\bar{t}) - i\delta)^2} + \\
&+ \frac{\hbar}{8} \pi \frac{\partial f}{\partial \omega} \frac{\Gamma_\alpha(\bar{t}) \partial_{\bar{t}}[\Gamma_\alpha(\bar{t})] \delta(\omega - a(\bar{t}))}{(\omega - a(\bar{t}) - i\delta)^2} - \frac{\hbar}{2} \pi i f \frac{\Gamma_\alpha(\bar{t}) \partial_{\bar{t}}[a(\bar{t})] \partial_\omega[\delta(\omega - a(\bar{t}))]}{(\omega - a(\bar{t}) - i\delta)^2} + \\
&+ \frac{\hbar}{4} \pi f \frac{\Gamma_\alpha(\bar{t}) \partial_{\bar{t}}[\Gamma_\alpha(\bar{t})] \partial_\omega[\delta(\omega - a(\bar{t}))]}{(\omega - a(\bar{t}) - i\delta)^2} - \frac{\hbar}{4} if \frac{\Gamma_\alpha(\bar{t}) \partial_{\bar{t}}[\Gamma_\alpha(\bar{t})]}{(\omega - a(\bar{t}) + i\delta)^2 \left[(\omega - a(\bar{t}))^2 + \left(\frac{\Gamma_\alpha(\bar{t})}{2} \right)^2 \right]} +
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \frac{\hbar}{2} f \frac{\partial_{\bar{t}}[\Gamma_{\alpha}(\bar{t})]}{(\omega - a(\bar{t}) + i\delta)^2 \left(\omega - a(\bar{t}) - i\frac{\Gamma_{\alpha}(\bar{t})}{2}\right)} - \frac{\hbar}{2} \pi i f \frac{\partial_{\bar{t}}[\Gamma_{\alpha}(\bar{t})] \partial_{\omega}[\delta(\omega - a(\bar{t}))]}{\left(\omega - a(\bar{t}) - i\frac{\Gamma_{\alpha}(\bar{t})}{2}\right)} \\
& - \frac{\hbar}{2} \pi i \frac{\partial f}{\partial \omega} \frac{\partial_{\bar{t}}[\Gamma_{\alpha}(\bar{t})] \delta(\omega - a(\bar{t}))}{\left(\omega - a(\bar{t}) - i\frac{\Gamma_{\alpha}(\bar{t})}{2}\right)} + \frac{\hbar}{2} i f \frac{\Gamma_{\alpha}(\bar{t})(\omega - a(\bar{t})) \partial_{\bar{t}}[\Gamma_{\alpha}(\bar{t})]}{(\omega - a(\bar{t}) + i\delta) \left[(\omega - a(\bar{t}))^2 + \left(\frac{\Gamma_{\alpha}(\bar{t})}{2}\right)^2 \right]^2} - \\
& - \frac{\hbar}{4} i \frac{\partial f}{\partial \omega} \frac{\Gamma_{\alpha}(\bar{t}) \partial_{\bar{t}}[\Gamma_{\alpha}(\bar{t})]}{(\omega - a(\bar{t}) + i\delta) \left[(\omega - a(\bar{t}))^2 + \left(\frac{\Gamma_{\alpha}(\bar{t})}{2}\right)^2 \right]^2} - \frac{\hbar}{2} f \frac{\partial_{\bar{t}}[\Gamma_{\alpha}(\bar{t})]}{(\omega - a(\bar{t}) + i\delta) \left(\omega - a(\bar{t}) - i\frac{\Gamma_{\alpha}(\bar{t})}{2}\right)^2} - \\
& - \frac{\hbar}{2} \pi i f \frac{\partial_{\bar{t}}[\Gamma_{\alpha}(\bar{t})] \delta(\omega - a(\bar{t}))}{\left(\omega - a(\bar{t}) - i\frac{\Gamma_{\alpha}(\bar{t})}{2}\right)^2}.
\end{aligned}$$

onde $f = f(\omega) = [e^{\beta(\omega - \mu)} + 1]^{-1}$ é a função de Fermi-Dirac e $\frac{\partial f}{\partial \omega}$ é a derivada da função de Fermi-Dirac. Ainda, temos que: $\partial_{\bar{t}} = \frac{\partial}{\partial \bar{t}}$ e $\partial_{\omega} = \frac{\partial}{\partial \omega}$.

Tomando o limite de $\delta \rightarrow 0$, fazendo algumas simplificações algébricas na equação acima e usando a seguinte relação:

$$\begin{aligned}
\delta(\omega - a(\bar{t})) & = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \exp[ix(\omega - a(\bar{t}))] \\
\frac{\partial}{\partial \bar{t}} \delta(\omega - a(\bar{t})) & = \int_{-\infty}^{+\infty} dx (-ix) \partial_{\bar{t}}[a(\bar{t})] \exp[ix(\omega - a(\bar{t}))] \\
& = -\partial_{\bar{t}}[a(\bar{t})] \frac{\partial}{\partial \omega} [\delta(\omega - a(\bar{t}))]
\end{aligned} \tag{3.94}$$

podemos escrever:

$$\begin{aligned}
G_{s,s}^{(1)<} & = \frac{(\omega - a(\bar{t}))}{\left(\omega - a(\bar{t}) + i\frac{\Gamma_{\alpha}(\bar{t})}{2}\right)} \left[-\frac{\hbar}{4} i \frac{\partial f}{\partial \omega} \frac{\Gamma_{\alpha}^2(\bar{t}) \partial_{\bar{t}}[a(\bar{t})]}{(\omega - a(\bar{t}))^2 \left[(\omega - a(\bar{t}))^2 + \left(\frac{\Gamma_{\alpha}(\bar{t})}{2}\right)^2 \right]} - \right. \\
& - \frac{\hbar}{4} i \frac{\partial f}{\partial \omega} \frac{\Gamma_{\alpha}^2(\bar{t}) \partial_{\bar{t}}[a(\bar{t})]}{(\omega - a(\bar{t}))^2 \left(\omega - a(\bar{t}) - i\frac{\Gamma_{\alpha}(\bar{t})}{2}\right)^2} - \frac{\hbar}{4} i \frac{\partial f}{\partial \omega} \frac{\Gamma_{\alpha}(\bar{t}) \partial_{\bar{t}}[\Gamma_{\alpha}(\bar{t})]}{(\omega - a(\bar{t})) \left(\omega - a(\bar{t}) - i\frac{\Gamma_{\alpha}(\bar{t})}{2}\right)^2} \\
& - \frac{\hbar}{4} i \frac{\partial f}{\partial \omega} \frac{\Gamma_{\alpha}(\bar{t}) \partial_{\bar{t}}[\Gamma_{\alpha}(\bar{t})]}{(\omega - a(\bar{t})) \left[(\omega - a(\bar{t}))^2 + \left(\frac{\Gamma_{\alpha}(\bar{t})}{2}\right)^2 \right]} - \frac{\hbar}{4} \pi i \frac{\partial f}{\partial \omega} \frac{\Gamma_{\alpha}(\bar{t}) \partial_{\bar{t}}[a(\bar{t})] \delta(\omega - a(\bar{t}))}{\left(\omega - a(\bar{t}) - i\frac{\Gamma_{\alpha}(\bar{t})}{2}\right)^2} + \\
& + \frac{\hbar}{8} \pi \frac{\partial f}{\partial \omega} \frac{\Gamma_{\alpha}(\bar{t}) \partial_{\bar{t}}[\Gamma_{\alpha}(\bar{t})] \delta(\omega - a(\bar{t}))}{\left(\omega - a(\bar{t}) - i\frac{\Gamma_{\alpha}(\bar{t})}{2}\right)^2} + \frac{\hbar}{4} \pi f \frac{\Gamma_{\alpha}(\bar{t}) \partial_{\bar{t}}[\Gamma_{\alpha}(\bar{t})] \partial_{\omega}[\delta(\omega - a(\bar{t}))]}{\left(\omega - a(\bar{t}) - i\frac{\Gamma_{\alpha}(\bar{t})}{2}\right)^2} - \\
& - \frac{\hbar}{2} \pi i f \frac{\partial_{\bar{t}}[\Gamma_{\alpha}(\bar{t})] \partial_{\omega}[\delta(\omega - a(\bar{t}))]}{\left(\omega - a(\bar{t}) - i\frac{\Gamma_{\alpha}(\bar{t})}{2}\right)} - \frac{\hbar}{2} \pi i \frac{\partial f}{\partial \omega} \frac{\partial_{\bar{t}}[\Gamma_{\alpha}(\bar{t})] \delta(\omega - a(\bar{t}))}{\left(\omega - a(\bar{t}) - i\frac{\Gamma_{\alpha}(\bar{t})}{2}\right)} - \\
& \left. - \frac{\hbar}{2} \pi i f \frac{\partial_{\bar{t}}[\Gamma_{\alpha}(\bar{t})] \delta(\omega - a(\bar{t}))}{\left(\omega - a(\bar{t}) - i\frac{\Gamma_{\alpha}(\bar{t})}{2}\right)^2} \right].
\end{aligned} \tag{3.95}$$

Nesse ponto, conhecemos as funções $G_{s,s}^{(0)<}(\omega, \bar{t})$ e $G_{s,s}^{(1)<}(\omega, \bar{t})$ o que nos possibilita calcular algumas grandezas físicas. No nosso trabalho, temos como objetivo calcular o número de ocupação médio, dado pela equação (3.5). Esse cálculo será feito no capítulo posterior.

Capítulo 4

Resultados

Esse capítulo será dedicado ao desenvolvimento do cálculo do número de ocupação médio dentro do ponto quântico bem como uma análise numérica dessas equações. Faremos esse cálculo usando as funções obtidas no capítulo anterior. É importante salientar que com as funções de Green obtidas no capítulo 3 podemos encontrar outros valores médios de grandezas importante, como por exemplo a corrente de tunelamento, como feito na ref. [36].

Quando calculamos as funções de Green usamos a aproximação (3.42) para dividi-las em dois termos: o de ordem zero correspondente aos termos de equilíbrio, e o de primeira ordem correspondentes aos termos em primeira ordem na perturbação; por isso, faz sentido também separarmos o número médio de partículas em termos de componentes de ordem zero, $\langle n_s^{(0)}(\bar{t}) \rangle$, e de primeira ordem, $\langle n_s^{(1)}(\bar{t}) \rangle$. Para calcular ambas as componentes temos que utilizar a equação (3.5) descrita no capítulo anterior.

Calcularemos separadamente os dois termos.

4.1 Ordem Zero

Nessa seção vamos calcular a componente de ordem zero do número de ocupação médio; reescrevendo a equação (3.5) para essa componente temos

$$\langle n_s^{(0)}(\bar{t}) \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi i} G_{s,s}^{(0)<}(\omega, \bar{t}). \quad (4.1)$$

Portanto para calcular a integral acima precisamos da equação (3.84); usando-a, escrevemos

$$\langle n_s^{(0)}(\bar{t}) \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi i} f(\omega) \left(\frac{i\Gamma_\alpha(\bar{t})}{(\omega - \epsilon_s(\bar{t}) - U \langle n_s^{(0)}(\bar{t}) \rangle)^2 + \frac{\Gamma_\alpha(\bar{t})^2}{4}} \right). \quad (4.2)$$

Observe que a equação acima relaciona spin \uparrow com spin \downarrow , pois o índice s diz respeito ao spin e $\bar{s} = -s$, ou seja, temos que o número médio de spins \uparrow depende de quantos spins \downarrow estão no ponto quântico. Com isso a equação acima deve ser resolvida auto-consistentemente. Podemos considerar que

$$\langle n(\bar{t}) \rangle = \langle n_{\uparrow}(\bar{t}) \rangle + \langle n_{\downarrow}(\bar{t}) \rangle, \quad (4.3)$$

onde $\langle n(\bar{t}) \rangle$ é o número total de spins dentro do ponto.

Para facilitar nossos cálculos vamos considerar a integral quando a temperatura for igual a $0K$, $T = 0K$, a essa temperatura $f(\omega)$, que é a função de Fermi-Dirac, toma a forma apresentada na figura (4.1).

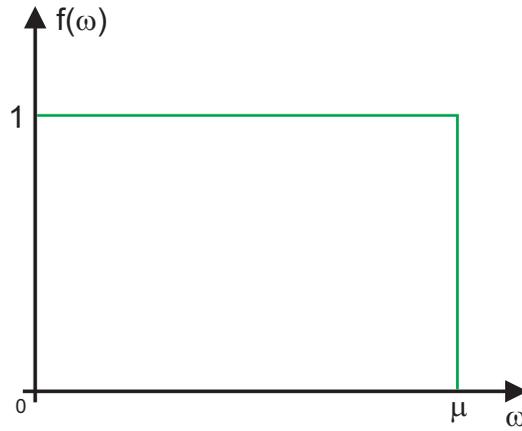


Figura 4.1: Função de Fermi-Dirac quando $T = 0K$

Ou seja, em nossa integral, o termo $f(\omega)$ funciona como uma função degrau, “filtrando a integral”. Assim podemos usar as simplificações que $f(\omega) = 1$ e que a integração será feita no seguinte intervalo $[-\infty, \mu]$, onde μ é o potencial químico.

Quando estamos avaliando a derivada da função de Fermi-Dirac em $T = 0K$, temos que considerar que estamos calculando a derivada de uma função degrau. Portanto,

$$\frac{\partial}{\partial \omega} f(\omega) = -\delta(\omega - \mu). \quad (4.4)$$

Para o cálculo da componente de ordem zero a equação (4.4) não se faz necessária, entretanto para a componente de primeira ordem esse resultado é de extrema importância.

Assim, reescrevendo nossa integral para $T = 0K$, temos

$$\langle n_s^{(0)(\bar{t})} \rangle = \int_{-\infty}^{\mu} \frac{d\omega}{2\pi} \left(\frac{\Gamma_{\alpha}(\bar{t})}{(\omega - \epsilon_s(\bar{t}) - U \langle n_{\bar{s}}(\bar{t}) \rangle)^2 + \frac{\Gamma_{\alpha}^2(\bar{t})}{4}} \right), \quad (4.5)$$

essa integral possui solução analítica:

$$\langle n_s^{(0)}(\bar{t}) \rangle = \frac{1}{2} - \frac{1}{\pi} \arctan \left(\frac{2 \left(\frac{\epsilon_s(\bar{t}) - \mu}{U} + \langle n_s^{(0)}(\bar{t}) \rangle \right)}{\Gamma_\alpha(\bar{t})/U} \right). \quad (4.6)$$

Escrevendo separadamente as equações de $\langle n_\uparrow^{(0)}(\bar{t}) \rangle$ e $\langle n_\downarrow^{(0)}(\bar{t}) \rangle$, temos

$$\langle n_\uparrow^{(0)}(\bar{t}) \rangle = \frac{1}{2} - \frac{1}{\pi} \arctan \left(\frac{2 \left(\frac{\epsilon_s(\bar{t}) - \mu}{U} + \langle n_\downarrow^{(0)}(\bar{t}) \rangle \right)}{\Gamma_\alpha(\bar{t})/U} \right) \quad (4.7)$$

$$\langle n_\downarrow^{(0)}(\bar{t}) \rangle = \frac{1}{2} - \frac{1}{\pi} \arctan \left(\frac{2 \left(\frac{\epsilon_s(\bar{t}) - \mu}{U} + \langle n_\uparrow^{(0)}(\bar{t}) \rangle \right)}{\Gamma_\alpha(\bar{t})/U} \right), \quad (4.8)$$

onde $\epsilon_s(\bar{t})$ e $\Gamma_\alpha(\bar{t})$ variam da seguinte forma:

$$\epsilon_s(\bar{t}) = \epsilon_0 + \epsilon_1 \cos(\Omega \bar{t}) \quad (4.9)$$

$$\Gamma_\alpha(\bar{t}) = \Gamma_{0,\alpha} + \Delta \Gamma_\alpha \cos(\Omega \bar{t} + \phi_\alpha). \quad (4.10)$$

Agora nosso problema se resume em resolver as duas equações acima de forma auto-consistente. Se observarmos, a equação (4.5) é essencialmente a equação encontrada por P. W. Anderson [43] em seu trabalho sobre impurezas magnéticas em metais. Nesse modelo é previsto que uma impureza em um metal pode apresentar comportamento magnético dependendo dos parâmetros da impureza e do metal hospedeiro. No nosso caso, o que assume um caráter *magnético* ou não-magnético é o ponto quântico.

Anderson descreve em um diagrama a mudança de comportamento de uma impureza. Na realidade, essa “mudança de comportamento” aparece no modelo com uma transição de fase. Entretanto, essa transição não pode existir uma vez que existe estamos tratando de um problema unidimensional. De fato, esse erro aparece devido a aproximação de campo médio.

Contudo, mesmo esta transição de fase sendo um artefato da aproximação feita, a mudança de regime é de fato observada. Esse problema só foi resolvido após o trabalho de Kondo que explicou que existe uma temperatura, T_K [equação (1.1)], tal que, quando $T \ll T_k$, acontece o processo de cotunelamento explicado anteriormente. Observe a figura (4.2) que mostra um gráfico de $x = \frac{\epsilon_s - \epsilon}{U}$ versus $\frac{\Delta}{U}$ (observe que Δ faz o papel de Γ_α) e ainda mostra T_K , para $x = 0.9$, em função de y . Fica claro nesse gráfico que quando estamos em uma região magnética T é pequeno, caracterizando o efeito Kondo.

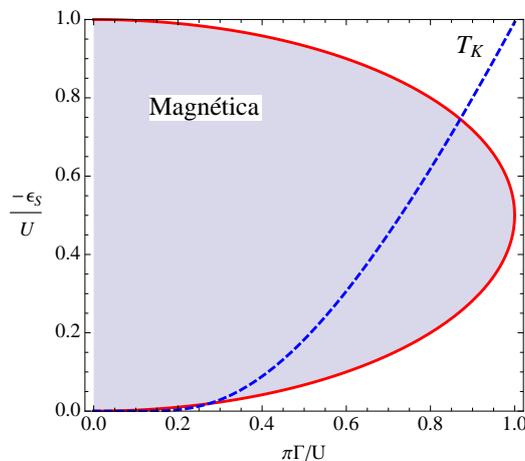


Figura 4.2: Diagrama mostrando as regiões de comportamento magnético e não-magnético previstas pelo modelo Anderson *versus* Temperatura Kondo para $\frac{-\epsilon_s}{U} = 0.9$

Como nosso resultado é idêntico ao resultado obtido por Anderson, esperamos encontrar essa mudança de comportamento prevista por ele no ponto quântico. Para verificar isso, escolhemos 4 valores de $\frac{U}{\Delta} = \frac{U}{\Gamma_{0,\alpha}}$: 3, 4, 5 e 6. Se compararmos ao diagrama de Anderson, observamos que valores grandes de $\frac{U}{\Delta}$ correspondem a regiões predominantemente magnéticas, enquanto o outro extremo corresponde a regiões quase que completamente não magnéticas. E vamos considerar também que nosso problema é independente do tempo. Isso significa que usaremos somente a parte “zero” das funções $\epsilon_s(\bar{t})$ e $\Gamma_\alpha(\bar{t})$. Vamos assumir que $\mu = \epsilon_F = 0$ é o nível de Fermi e estamos diminuindo ϵ_s até o nível de Fermi. Ainda, é importante ressaltar que estamos calculando o número de ocupação médio total.

Assim, na figura (4.3) mostramos o resultado auto-consistente das equações (4.6) e (4.7), para os quatro valores fixos de $\frac{U}{\Delta} = \frac{U}{\Gamma_\alpha}$ descritos no parágrafo anterior. Como podemos observar, é notável a mudança de comportamento na curva do número médio de ocupação do ponto. Quando $\frac{U}{\Gamma_\alpha} = 3 \Rightarrow \frac{\Gamma_\alpha}{U} \cong 0.33$ [figura (4.3-a)] estamos em uma região onde existe um intervalo em o ponto é não-magnético. Já para $\frac{U}{\Gamma_\alpha} = 6 \Rightarrow \frac{\Gamma_\alpha}{U} \cong 0.16$ [figura (4.3-d)], o ponto é completamente magnético. A mudança na curva se dá através do aparecimento dos patamares.

Existe uma explicação para o aparecimento desses patamares. Quando temos o ponto comportando-se como uma impureza magnética, somente um elétron com um determinado spin pode ocupar o nível ϵ_s (se o ponto se com-

portasse como uma impureza não magnética, dois elétrons poderiam ocupar o ponto, um com spin “up” e outro “down”). Isso acontecendo, o ponto quântico, que antes estava desocupado, passa a ter metade dos seus níveis ocupado. Um próximo elétron só pode ocupar o nível $\epsilon_s + U$; então, quando esse nível fica acessível para o elétron, ele consegue tunelar e o ponto fica completamente ocupado.

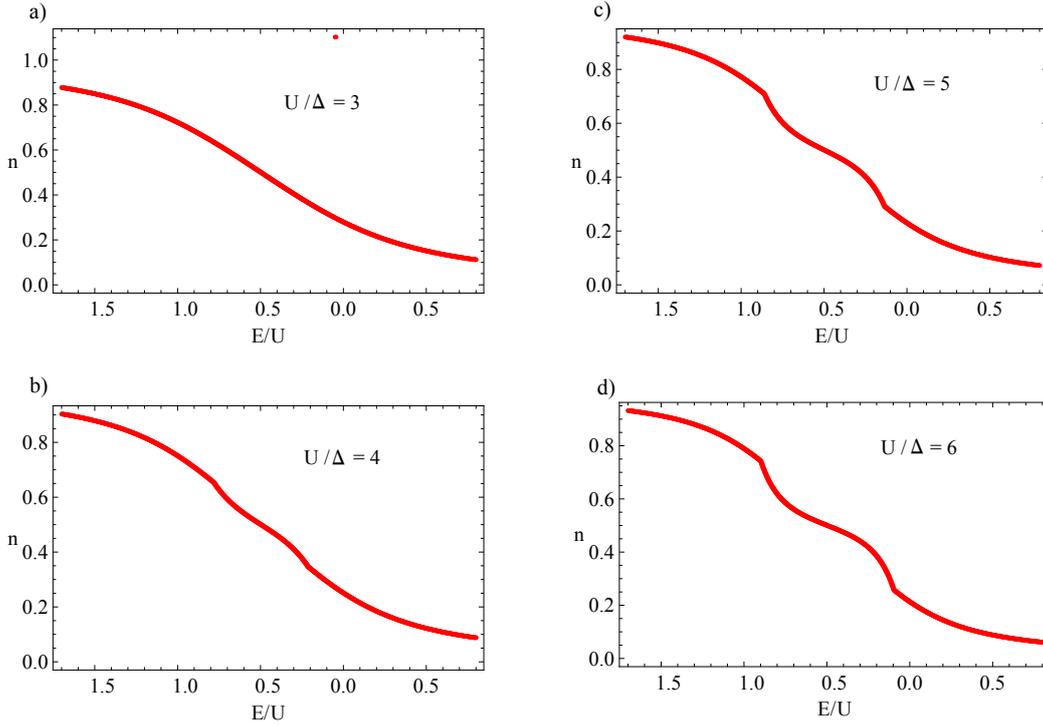


Figura 4.3: Curva do número médio de ocupação *versus* $\frac{E}{U} = \frac{\epsilon_s}{U}$, para quatro valores de $\frac{U}{\Delta} = \frac{U}{\Gamma_\alpha}$ distintos. (a) $\frac{U}{\Gamma_\alpha} = 3$. (b) $\frac{U}{\Gamma_\alpha} = 4$. (c) $\frac{U}{\Gamma_\alpha} = 5$. (d) $\frac{U}{\Gamma_\alpha} = 6$.

Observe que para obter o resultado da figura (4.6) não consideramos a dependência temporal de $\langle n_s^{(0)}(\bar{t}) \rangle$. Entretanto, tendo a função (4.6) e sabendo que os parâmetros dependentes do tempo variam de acordo com (4.9) e (4.10), nada nos impede de encontrar como $\langle n_s^{(0)}(\bar{t}) \rangle$ varia em função de $\Omega\bar{t}$.

Mostramos esse resultado na figura (4.4). Esse resultado é obtido no regime onde o ponto está no regime não magnético. Para garantir que isso fosse obedecido, escolhemos que $\epsilon_0/U = -0.1$ e $\Gamma_{0,\alpha}/U = 0.9/\pi$, com $\epsilon_1/U = 0.05$ e $\Delta\Gamma_\alpha/U = 0.05/\pi$. Ainda, escolhemos $\phi_\alpha = \pi/2$, onde temos a maior diferença de fase entre nossos parâmetros.

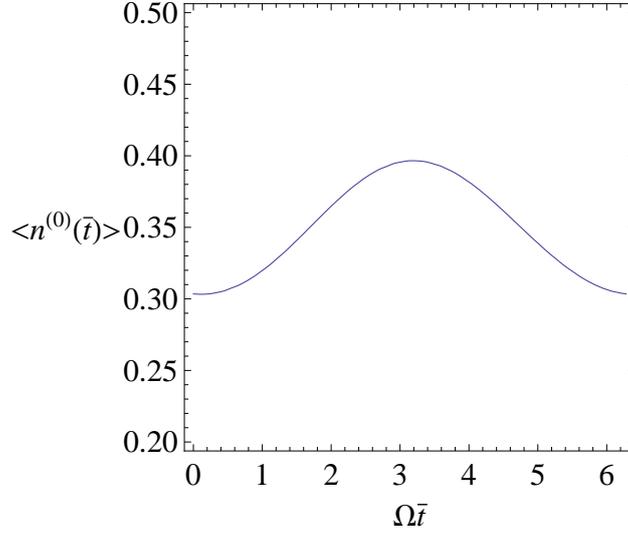


Figura 4.4: Curva do número médio de ocupação *versus* $\Omega \bar{t}$.

Os resultados apresentados até o momento dizem respeito as componentes de ordem zero da minha solução. Na próxima seção, mostraremos a solução de primeira ordem.

4.2 Primeira Ordem

Agora vamos calcular a componente de primeira ordem. Para isso precisamos da função de Green calculada no capítulo anterior: $G_{ss}^{(1)<}(\omega, \bar{t})$, pois, da mesma forma que fizemos na seção anterior, precisamos resolver a seguinte integral

$$\langle n_s^{(1)}(\bar{t}) \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi i} G_{s,s}^{(1)<}(\omega, \bar{t}). \quad (4.11)$$

Assim, substituindo $G_{s,s}^{(1)<}(\omega, \bar{t})$ dado pela equação (3.95). E considerando que nossos cálculos estão sendo feitos a $T = 0K$, por isso devemos utilizar a derivada (4.4), podemos escrever:

$$\langle n_s^{(1)}(\bar{t}) \rangle = \int_{-\infty}^{\mu} \frac{d\omega}{2\pi i} \frac{(\omega - a(\bar{t}))}{\left(\omega - a(\bar{t}) + i \frac{\Gamma_\alpha(\bar{t})}{2}\right)} \left[\frac{\hbar}{4} i \frac{\Gamma_\alpha^2(\bar{t}) \partial_{\bar{t}}[a(\bar{t})] \delta(\omega - \mu)}{(\omega - a(\bar{t}))^2 \left[(\omega - a(\bar{t}))^2 + \left(\frac{\Gamma_\alpha(\bar{t})}{2}\right)^2 \right]} \right] +$$

$$\begin{aligned}
& + \frac{\hbar}{4} i \frac{\Gamma_\alpha^2(\bar{t}) \partial_{\bar{t}}[a(\bar{t})] \delta(\omega - \mu)}{(\omega - a(\bar{t}))^2 \left(\omega - a(\bar{t}) - i \frac{\Gamma_\alpha(\bar{t})}{2} \right)^2} + \frac{\hbar}{4} i \frac{\Gamma_\alpha(\bar{t}) \partial_{\bar{t}}[\Gamma_\alpha(\bar{t})] \delta(\omega - \mu)}{(\omega - a(\bar{t})) \left(\omega - a(\bar{t}) - i \frac{\Gamma_\alpha(\bar{t})}{2} \right)^2} \\
& + \frac{\hbar}{4} i \frac{\Gamma_\alpha(\bar{t}) \partial_{\bar{t}}[\Gamma_\alpha(\bar{t})] \delta(\omega - \mu)}{(\omega - a(\bar{t})) \left[(\omega - a(\bar{t}))^2 + \left(\frac{\Gamma_\alpha(\bar{t})}{2} \right)^2 \right]} + \frac{\hbar}{4} \pi i \frac{\Gamma_\alpha(\bar{t}) \partial_{\bar{t}}[a(\bar{t})] \delta(\omega - a(\bar{t})) \delta(\omega - \mu)}{\left(\omega - a(\bar{t}) - i \frac{\Gamma_\alpha(\bar{t})}{2} \right)^2} \\
& - \frac{\hbar}{8} \pi \frac{\Gamma_\alpha(\bar{t}) \partial_{\bar{t}}[\Gamma_\alpha(\bar{t})] \delta(\omega - a(\bar{t})) \delta(\omega - \mu)}{\left(\omega - a(\bar{t}) - i \frac{\Gamma_\alpha(\bar{t})}{2} \right)^2} + \frac{\hbar}{4} \pi f \frac{\Gamma_\alpha(\bar{t}) \partial_{\bar{t}}[\Gamma_\alpha(\bar{t})] \partial_\omega [\delta(\omega - a(\bar{t}))]}{\left(\omega - a(\bar{t}) - i \frac{\Gamma_\alpha(\bar{t})}{2} \right)^2} \\
& - \frac{\hbar}{2} \pi i f \frac{\partial_{\bar{t}}[\Gamma_\alpha(\bar{t})] \partial_\omega [\delta(\omega - a(\bar{t}))]}{\left(\omega - a(\bar{t}) - i \frac{\Gamma_\alpha(\bar{t})}{2} \right)} + \frac{\hbar}{2} \pi i \frac{\partial_{\bar{t}}[\Gamma_\alpha(\bar{t})] \delta(\omega - a(\bar{t})) \delta(\omega - \mu)}{\left(\omega - a(\bar{t}) - i \frac{\Gamma_\alpha(\bar{t})}{2} \right)} \\
& - \left. \frac{\hbar}{2} \pi i f \frac{\partial_{\bar{t}}[\Gamma_\alpha(\bar{t})] \delta(\omega - a(\bar{t}))}{\left(\omega - a(\bar{t}) - i \frac{\Gamma_\alpha(\bar{t})}{2} \right)^2} \right]. \tag{4.12}
\end{aligned}$$

Calculando cada integral separadamente, e tomando $\mu = 0$ temos

$$\begin{aligned}
I_1 & = \int_{-\infty}^0 \frac{d\omega}{2\pi i} \frac{(\omega - a(\bar{t}))}{\left(\omega - a(\bar{t}) + i \frac{\Gamma_\alpha(\bar{t})}{2} \right)} \left[\frac{\hbar}{4} i \frac{\Gamma_\alpha^2(\bar{t}) \partial_{\bar{t}}[a(\bar{t})] \delta(\omega - \mu)}{(\omega - a(\bar{t}))^2 \left[(\omega - a(\bar{t}))^2 + \left(\frac{\Gamma_\alpha(\bar{t})}{2} \right)^2 \right]} \right] \\
& = -\frac{1}{\pi} \frac{\hbar}{2} \frac{\frac{\Gamma_\alpha^2(\bar{t})}{4}}{\left(-a(\bar{t}) + i \frac{\Gamma_\alpha(\bar{t})}{2} \right)} \frac{\partial_{\bar{t}}[a(\bar{t})]}{a(\bar{t}) \left[a^2(\bar{t}) + \left(\frac{\Gamma_\alpha(\bar{t})}{2} \right)^2 \right]}. \tag{4.13}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
I_2 & = \int_{-\infty}^0 \frac{d\omega}{2\pi i} \frac{(\omega - a(\bar{t}))}{\left(\omega - a(\bar{t}) + i \frac{\Gamma_\alpha(\bar{t})}{2} \right)} \left[\frac{\hbar}{4} i \frac{\Gamma_\alpha^2(\bar{t}) \partial_{\bar{t}}[a(\bar{t})] \delta(\omega - \mu)}{(\omega - a(\bar{t}))^2 \left(\omega - a(\bar{t}) - i \frac{\Gamma_\alpha(\bar{t})}{2} \right)^2} \right] \\
& = -\frac{1}{\pi} \frac{\hbar}{2} \frac{\frac{\Gamma_\alpha^2(\bar{t})}{4}}{\left(-a(\bar{t}) - i \frac{\Gamma_\alpha(\bar{t})}{2} \right)} \frac{\partial_{\bar{t}}[a(\bar{t})]}{a(\bar{t}) \left[a^2(\bar{t}) + \left(\frac{\Gamma_\alpha(\bar{t})}{2} \right)^2 \right]}. \tag{4.14}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
I_3 & = \int_{-\infty}^0 \frac{d\omega}{2\pi i} \frac{(\omega - a(\bar{t}))}{\left(\omega - a(\bar{t}) + i \frac{\Gamma_\alpha(\bar{t})}{2} \right)} \left[\frac{\hbar}{4} i \frac{\Gamma_\alpha(\bar{t}) \partial_{\bar{t}}[\Gamma_\alpha(\bar{t})] \delta(\omega - \mu)}{(\omega - a(\bar{t})) \left(\omega - a(\bar{t}) - i \frac{\Gamma_\alpha(\bar{t})}{2} \right)^2} \right] \\
& = \frac{1}{\pi} \frac{\hbar}{4} \frac{\frac{\Gamma_\alpha(\bar{t})}{2}}{\left(-a(\bar{t}) - i \frac{\Gamma_\alpha(\bar{t})}{2} \right)} \frac{\partial_{\bar{t}}[\Gamma_\alpha(\bar{t})]}{\left[a^2(\bar{t}) + \left(\frac{\Gamma_\alpha(\bar{t})}{2} \right)^2 \right]}. \tag{4.15}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
I_4 &= \int_{-\infty}^0 \frac{d\omega}{2\pi i} \frac{(\omega - a(\bar{t}))}{\left(\omega - a(\bar{t}) + i\frac{\Gamma_\alpha(\bar{t})}{2}\right)} \left[\frac{\hbar}{4} i \frac{\Gamma_\alpha(\bar{t}) \partial_{\bar{t}}[\Gamma_\alpha(\bar{t})] \delta(\omega - \mu)}{(\omega - a(\bar{t})) \left[(\omega - a(\bar{t}))^2 + \left(\frac{\Gamma_\alpha(\bar{t})}{2}\right)^2 \right]} \right] \\
&= \frac{1}{\pi} \frac{\hbar}{4} \frac{\frac{\Gamma_\alpha(\bar{t})}{2}}{\left(-a(\bar{t}) + i\frac{\Gamma_\alpha(\bar{t})}{2}\right)} \frac{\partial_{\bar{t}}[\Gamma_\alpha(\bar{t})]}{\left[a^2(\bar{t}) + \left(\frac{\Gamma_\alpha(\bar{t})}{2}\right)^2\right]}. \tag{4.16}
\end{aligned}$$

Observe que, para as quatro integrais calculadas anteriormente, usamos a seguinte propriedade da função delta de Dirac:

$$\int_{-\infty}^b dx g(x) \delta(x - a) = \begin{cases} g(x = a) & \text{se } a \in [-\infty, b] \\ 0 & \text{se } a \notin [-\infty, b] \end{cases}$$

onde g é uma função que depende de x . Usaremos essa propriedade mais adiante também.

$$\begin{aligned}
I_5 &= \int_{-\infty}^0 \frac{d\omega}{2\pi i} \frac{(\omega - a(\bar{t}))}{\left(\omega - a(\bar{t}) + i\frac{\Gamma_\alpha(\bar{t})}{2}\right)} \left[\frac{\hbar}{4} \pi i \frac{\Gamma_\alpha(\bar{t}) \partial_{\bar{t}}[a(\bar{t})] \delta(\omega - a(\bar{t})) \delta(\omega - \mu)}{\left(\omega - a(\bar{t}) - i\frac{\Gamma_\alpha(\bar{t})}{2}\right)^2} \right] \\
&= \frac{\hbar}{4} \frac{\frac{\Gamma_\alpha(\bar{t})}{2} \partial_{\bar{t}}[a(\bar{t})]}{\left(\omega - a(\bar{t}) - i\frac{\Gamma_\alpha(\bar{t})}{2}\right)} \frac{(\omega - a(\bar{t}))}{\left[(\omega - a(\bar{t}))^2 + \left(\frac{\Gamma_\alpha(\bar{t})}{2}\right)^2\right]} \Bigg|_{\omega=a(\bar{t})} \delta(a(\bar{t}) - \mu) \\
&= 0 \tag{4.17}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
I_6 &= \int_{-\infty}^0 \frac{d\omega}{2\pi i} \frac{(\omega - a(\bar{t}))}{\left(\omega - a(\bar{t}) + i\frac{\Gamma_\alpha(\bar{t})}{2}\right)} \left[\frac{\hbar}{8} \pi \frac{\Gamma_\alpha(\bar{t}) \partial_{\bar{t}}[\Gamma_\alpha(\bar{t})] \delta(\omega - a(\bar{t})) \delta(\omega - \mu)}{\left(\omega - a(\bar{t}) - i\frac{\Gamma_\alpha(\bar{t})}{2}\right)^2} \right] \\
&= -\frac{1}{i} \frac{\hbar}{8} \frac{\frac{\Gamma_\alpha(\bar{t})}{2} \partial_{\bar{t}}[\Gamma_\alpha(\bar{t})]}{\left(\omega - a(\bar{t}) - i\frac{\Gamma_\alpha(\bar{t})}{2}\right)} \frac{(\omega - a(\bar{t}))}{\left[(\omega - a(\bar{t}))^2 + \left(\frac{\Gamma_\alpha(\bar{t})}{2}\right)^2\right]} \Bigg|_{\omega=a(\bar{t})} \delta(a(\bar{t}) - \mu) \\
&= 0 \tag{4.18}
\end{aligned}$$

$$I_7 = \int_{-\infty}^0 \frac{d\omega}{2\pi i} \frac{\omega - a(\bar{t})}{\left[(\omega - a(\bar{t}))^2 + \left(\frac{\Gamma_\alpha(\bar{t})}{2}\right)^2\right] \left(\omega - a(\bar{t}) - i\frac{\Gamma_\alpha(\bar{t})}{2}\right)} \left[\frac{\hbar}{4} \pi \Gamma_\alpha(\bar{t}) \partial_{\bar{t}}[\Gamma_\alpha(\bar{t})] \partial_\omega[\delta(\omega - a(\bar{t}))] \right]$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{\hbar}{4} \frac{1}{i} \frac{\Gamma_\alpha(\bar{t})}{2} \partial_{\bar{t}}[\Gamma_\alpha(\bar{t})] \left(\left[\frac{[(\omega - a(\bar{t}))^2 + (\frac{\Gamma_\alpha(\bar{t})}{2})^2] (\omega - a(\bar{t}) - i\frac{\Gamma_\alpha(\bar{t})}{2}) - (\omega - a(\bar{t}))[\dots]}{[(\omega - a(\bar{t}))^2 + (\frac{\Gamma_\alpha(\bar{t})}{2})^2]^2 (\omega - a(\bar{t}) - i\frac{\Gamma_\alpha(\bar{t})}{2})^2} \right] \right) \Big|_{\omega=a(\bar{t})} \\
&= -\frac{\hbar}{4} \frac{\partial_{\bar{t}}[\Gamma_\alpha(\bar{t})]}{(\frac{\Gamma_\alpha(\bar{t})}{2})^2} \tag{4.19}
\end{aligned}$$

onde [...] seria a derivada do denominador do integrando. Mas esse termo está multiplicado a $(\omega - a(\bar{t}))$, e estamos calculando pra $\omega = a(\bar{t})$, portanto essa derivada será multiplicada por 0. Por isso ela não foi escrita explicitamente.

$$\begin{aligned}
I_8 &= \int_{-\infty}^0 \frac{d\omega}{2\pi i} \frac{\omega - a(\bar{t})}{[(\omega - a(\bar{t}))^2 + (\frac{\Gamma_\alpha(\bar{t})}{2})^2]} \left[-\frac{\hbar}{2} \pi i (\omega - a(\bar{t}) - i\frac{\Gamma_\alpha(\bar{t})}{2}) \partial_{\bar{t}}[\Gamma_\alpha(\bar{t})] \partial_\omega[\omega - a(\bar{t})] \right] \\
&= \frac{\hbar}{4} \partial_{\bar{t}}[\Gamma_\alpha(\bar{t})] \left[\frac{[(\omega - a(\bar{t}))^2 + (\frac{\Gamma_\alpha(\bar{t})}{2})^2] - (\omega - a(\bar{t}))[\dots]}{[(\omega - a(\bar{t}))^2 + (\frac{\Gamma_\alpha(\bar{t})}{2})^2]^2} \right] \Big|_{\omega=a(\bar{t})} \\
&= \frac{\hbar}{4} \frac{\partial_{\bar{t}}[\Gamma_\alpha(\bar{t})]}{(\frac{\Gamma_\alpha(\bar{t})}{2})^2}. \tag{4.20}
\end{aligned}$$

$$(4.21)$$

$$\begin{aligned}
I_9 &= \int_{-\infty}^0 \frac{d\omega}{2\pi i} \frac{(\omega - a(\bar{t}))}{(\omega - a(\bar{t}) + i\frac{\Gamma_\alpha(\bar{t})}{2})} \left[\frac{\hbar}{2} \pi i \frac{\partial_{\bar{t}}[\Gamma_\alpha(\bar{t})] \delta(\omega - a(\bar{t})) \delta(\omega - \mu)}{(\omega - a(\bar{t}) - i\frac{\Gamma_\alpha(\bar{t})}{2})} \right] \\
&= \frac{\hbar}{4} \partial_{\bar{t}}[\Gamma_\alpha(\bar{t})] \frac{(\omega - a(\bar{t}))}{[(\omega - a(\bar{t}))^2 + (\frac{\Gamma_\alpha(\bar{t})}{2})^2]} \Big|_{\omega=a(\bar{t})} \delta(a(\bar{t}) - \mu) \\
&= 0 \tag{4.22}
\end{aligned}$$

Observe que, para I_7 , I_8 e I_9 , usamos a seguinte propriedade da função delta de Dirac:

$$\int_{-\infty}^b dx g(x) \frac{d\delta(x - a)}{dx} = \begin{cases} -\frac{dg(x)}{dx} \Big|_{x=a} & \text{se } a \in [-\infty, b] \\ 0 & \text{se } a \notin [-\infty, b] \end{cases}$$

onde g é uma função que depende de x .

$$\begin{aligned}
I_{10} &= \int_{-\infty}^0 \frac{d\omega}{2\pi i} \frac{\omega - a(\bar{t})}{\left[(\omega - a(\bar{t}))^2 + \left(\frac{\Gamma_\alpha(\bar{t})}{2} \right)^2 \right] \left(\omega - a(\bar{t}) - i \frac{\Gamma_\alpha(\bar{t})}{2} \right)} \left[-\frac{\hbar}{2} \pi i \partial_{\bar{t}} [\Gamma_\alpha(\bar{t})] \delta(\omega - a(\bar{t})) \right] \\
&= 0.
\end{aligned} \tag{4.23}$$

Somando todas as integrais calculadas anteriormente, encontramos a expressão para $\langle n_s^{(1)}(\bar{t}) \rangle$:

$$\langle n_s^{(1)}(\bar{t}) \rangle = \frac{\hbar \Gamma_\alpha^2(\bar{t})}{\pi} \frac{\partial_{\bar{t}}[a(\bar{t})]}{4 \left[a^2(\bar{t}) + \left(\frac{\Gamma_\alpha(\bar{t})}{2} \right)^2 \right]^2} - \frac{\hbar \Gamma_\alpha(\bar{t})}{2\pi} \frac{a(\bar{t}) \partial_{\bar{t}}[\Gamma_\alpha(\bar{t})]}{2 \left[a^2(\bar{t}) + \left(\frac{\Gamma_\alpha(\bar{t})}{2} \right)^2 \right]^2}, \tag{4.24}$$

onde, lembrando que $a(\bar{t}) = \epsilon_s(\bar{t}) + U \langle n_s^{(0)}(\bar{t}) \rangle$.

Para encontrarmos a expressão final de $\langle n_s^{(1)}(\bar{t}) \rangle$ precisamos calcular as derivadas $\partial_{\bar{t}}[\Gamma_\alpha(\bar{t})]$ e $\partial_{\bar{t}}[a(\bar{t})]$. A primeira derivada é fácil, somente é preciso derivar a equação (4.10). Já na segunda derivada, além de ser preciso derivar a equação (4.9), se faz necessário também derivar $\langle n_s^{(1)}(\bar{t}) \rangle$. Precisamos, então derivar a equação (4.6). Uma vez feito isso, chegamos a seguinte equação:

$$\begin{aligned}
\langle n_s^{(1)}(\bar{t}) \rangle &= \frac{\xi \Gamma_\alpha(\bar{t})}{2\pi} \frac{\Gamma_{0,\alpha}/U}{\left[\left(\frac{\epsilon_s(\bar{t})}{U} + \langle n_s^{(0)}(\bar{t}) \rangle \right)^2 + \frac{1}{4} \left(\frac{\Gamma_\alpha(\bar{t})}{U} \right)^2 \right]^2} \times \\
&\times \left[\frac{\Gamma_\alpha(\bar{t})}{2U} \left(-\frac{\epsilon_1}{U} \sin(\Omega\bar{t}) - \frac{\left(\frac{\epsilon_s(\bar{t})}{U} + \langle n_s^{(0)}(\bar{t}) \rangle \right) \frac{\Delta\Gamma_\alpha}{U} \sin(\Omega\bar{t} + \phi_\alpha) - \frac{\Gamma_\alpha(\bar{t})}{U} \frac{\epsilon_1}{U} \sin(\Omega\bar{t})}{\frac{\Gamma_\alpha(\bar{t})}{U} + 2\pi \left[\left(\frac{\epsilon_s(\bar{t})}{U} + \langle n_s^{(0)}(\bar{t}) \rangle \right)^2 + \frac{1}{4} \left(\frac{\Gamma_\alpha(\bar{t})}{U} \right)^2 \right]} \right) \right] + \\
&+ \frac{1}{2} \sin(\Omega\bar{t}) \left(\frac{\epsilon_s(\bar{t})}{U} + \langle n_s^{(0)}(\bar{t}) \rangle \right) \frac{\Delta\Gamma_\alpha}{U},
\end{aligned} \tag{4.25}$$

onde se fez necessário a definição do parâmetro de adiabaticidade:

$$\xi \equiv \frac{\hbar\Omega}{\Gamma_{0,\alpha}}. \tag{4.26}$$

Analisando esse parâmetro, podemos entender $\frac{\hbar}{\Gamma_{0,\alpha}} = \tau$ como o tempo de meia vida do elétron dentro do ponto. Assim,

$$\xi = \Omega\tau.$$

Para estarmos dentro de um regime adiabático,

$$\Omega\tau \ll 1,$$

então,

$$\xi \ll 1. \quad (4.27)$$

Observe que na equação (4.25), diferente da equação para $\langle n_s^{(0)}(\bar{t}) \rangle$ não é uma equação de auto-consistência. Entretanto devemos usar o resultado da figura (4.4) para calcularmos as contribuições de primeira ordem.

Da mesma forma que feito para calcular $\langle n_s^{(0)}(\bar{t}) \rangle$ em função de $\Omega\bar{t}$, também vamos considerar que estamos estudando a solução no regime não-magnético. Usando os mesmo parâmetros usados para plotar a figura (4.4), podemos calcular as correções de primeira ordem para o número médio de ocupação do ponto quântico.

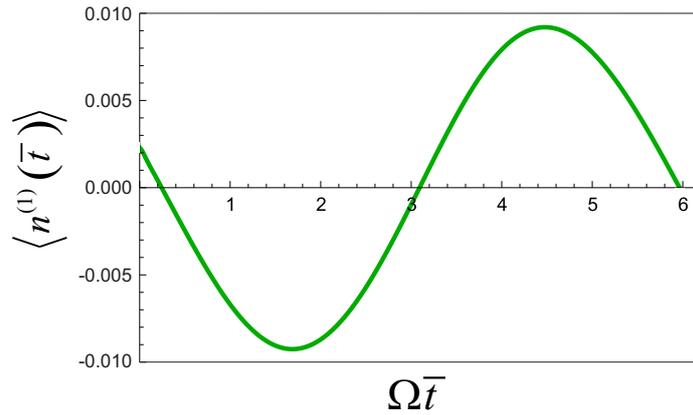


Figura 4.5: Correções de primeira ordem para o número médio de ocupação do ponto quântico. $\frac{\epsilon_0}{U} = -0.5$, $\frac{\epsilon_1}{U} = 0.05$, $\frac{U}{\Gamma_{0,\alpha}} = 3$, $\frac{\Delta\Gamma}{U} = 0.05$, $\phi_L = -\phi_R = \pi/2$, $\langle n^{(0)} \rangle = 0.5$.

Quando assumimos $\phi_\alpha = \pi/2$ significa que estamos calculando tudo que acontece no contato esquerdo [pois $\phi_l = -\phi_r = \pi/2$]. Observe a figura (4.5). Podemos interpretar que um elétron tem maior probabilidade de entrar no ponto quântico pelo canal da esquerda (visto pelo vale próximo a origem) e uma probabilidade muito pequena de sair por esse mesmo canal.

Pensando no mesmo gráfico de $\langle n^{(1)} \rangle$ para o canal da direita imaginamos que seu pico e vales estejam invertidos, pois entre o canal da direita e o da

esquerda existe uma diferença de fase de π . Assim um elétron tem pouca probabilidade de entrar no ponto quântico pelo canal da direita, mas tem uma grande probabilidade de sair por esse canal.

Sendo assim, esperamos que exista uma corrente de elétrons fluindo no sistema da esquerda para a direita. Essa corrente foi amplamente discutida na ref [41], entretanto nesse trabalho não será calculada. Mesmo assim, observe que após calcularmos $\langle n^{(0)} \rangle$ e $\langle n^{(1)} \rangle$, temos todas as ferramentas para encontrar essa corrente bombeada na aproximação adiabática. Essa expressão surge da equação (3.6), submetida a aproximação adiabática introduzida na seção 3.3.1. Na ref [44] podemos encontrar de forma detalhada como deduzir a partir de (3.6) essa expressão da corrente.

Capítulo 5

Conclusões e Perspectivas

Nesse trabalho estudamos o processo de transporte adiabático em um ponto quântico interagente no regime de bloqueio de Coulomb. A principal motivação para estudar esse tema é entender o surgimento de uma corrente de tunelamento mesmo na ausência de uma diferença de potencial externa.

Como ponto de partida tivemos que caracterizar um ponto quântico, isso foi feito no capítulo introdutório. Nesse capítulo também limitamos o regime de Bloqueio de Coulomb. Para tal, foi necessário entender o Efeito Kondo, limitando então o regime de temperatura que usamos.

A primeira dificuldade do sistema é que no Hamiltoniano existem dois parâmetros dependentes do tempo: $\epsilon_s(t)$ e $V_{k\alpha}(t)$. Isso produz uma evolução temporal não-trivial e, assim, não podemos usar as técnicas usuais de muitos corpos, por exemplo o método das funções de Green. Com isso, tivemos que desenvolver o Formalismo de Função de Green de não-equilíbrio ou formalismo de Keldysh [Capítulo 2].

Uma vez entendido esse formalismo, temos que aplicá-lo no Hamiltoniano que descreve o processo. Usando o método da equação de movimento, juntamente com a aproximação de campo médio, encontramos as funções de Green que descrevem o ponto. Durante esse processo, adotamos o regime adiabático e pegamos somente termos de primeira ordem no tempo lento (essa grandeza foi definida no capítulo 3). Outra ferramenta usada foram as regras de Langreth, fundamental para encontrarmos as contribuições de primeira das funções de Green.

No Capítulo 4 calculamos o número de ocupação médio dentro do ponto. Assim como fizemos com as funções de Green, dividimos o número de ocupação em dois termos: o termo de ordem zero $\langle n^{(0)} \rangle$ e o de primeira ordem $\langle n^{(1)} \rangle$. Para as contribuições de ordem zero (ou de equilíbrio), encontramos uma solução do tipo Anderson. Isso nos motivou a considerar o ponto como uma impureza magnética. No caso das contribuições de primeira ordem, encontra-

mos uma solução analítica para o número de ocupação médio. Essa solução não é auto-consistente como a de $\langle n^{(0)} \rangle$, mas também se mostra que $\langle n_{\uparrow} \rangle$ e $\langle n_{\downarrow} \rangle$ são diferentes quando estamos em um regime magnético.

Com as funções de Green desenvolvidas no capítulo 3 e o número médio de ocupação é possível calcular a corrente de tunelamento, ou corrente bombeada dependente do tempo. Entretanto, um fato novo surge de considerarmos que o ponto possa ser “magnético”, podemos na existência de uma corrente de spin tal qual nas refs. [45, 46, 47, 48]. Portanto essa dissertação tem como possibilidade futura estudar a existência de correntes de spin em um ponto quântico interagente.

Bibliografia

- [1] A. I. Ekimov e A. A. Onushchenko, JETP **34**, 349 (1981).
- [2] L. Kouwenhoven e C. Marcus, Phys. World **35**, June (1998).
- [3] A. Löfgren, C. A. Marlow, I. Shorubalko, R. P. Taylor, P. Omling, L. Samuelson e H. Linke, Phys. Rev. Lett. **92**, 046803 (2004).
- [4] A. Angers, E. Zakka-Bajjani, R. Deblock, S. Guéron, H. Bouchiat, A. Cavanna, V. Gennser e M. Polianski, Phys. Rev. B **75**, 115309 (2007).
- [5] T. Christen e M. Büttiker, Europhys. Lett. **35**, 523 (1996).
- [6] M. L. Polianski e M. Büttiker, Phys. Rev. B **76**, 205308 (2007).
- [7] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu e F. Laloe, *Quantum Mechanics, vol 1* (Wiley-Interscience, 1982).
- [8] Primeira realização experimental de um ponto quântico via eletrodos sobre uma superfície de GaAs: U. Meirav, M. A. Kastner e S. J. Wind, Phys. Rev. Lett **65**, 771 (1990).
- [9] R. Landauer, IBM J. Res Develop. **1**, 223 (1957).
- [10] Y. Imry e R. Landauer, Rev. Mod. Phys. **71**, 5306 (1999).
- [11] L. V. Keldysh, Sov. Phys. JETP **20**, 1018 (1965).
- [12] L. P. Kadanoff e G. Baym, *Quantum Statistical Mechanics* (Benjamin, New York, 1962).
- [13] W. J. de Haas, J. H. de Boer e G. J. van der Berg, Physica **1**, 1115 (1934).
- [14] J. Kondo, Prog. Theor. Phys. **32**, 37 (1964).

- [15] L. I. Glazman e M. E. Raikh, JETP Lett. **47**, 452 (1988).
- [16] T. K. Ng e P. A. Lee, Phys. Rev. Lett. **61**, 1768 (1988).
- [17] D. Goldhaber-Gordon, H. Shtrikman, D. Mahalu, *et al.*, Nature **391**, 156, (1998).
- [18] D. Goldhaber-Gordon, J. Gores, M. A. Kastner, *et al.*, Phys. Rev. Lett. **81**, 5225, (1998).
- [19] D. Ferry, S. Goodnick e J. Bird, *Transport in Nanostructures* (Cambridge University Press, Cambridge, 2009).
- [20] W. G. van der Wiel, S. De Franceschi, J. M. Elzerman, *et al.*, Science **281**, 540, (1998).
- [21] A.C. Hewson, *The Kondo Problem to Heavy Fermions* (Cambridge University Press, Cambridge, 1993)
- [22] H. van Houten, C. W. J. Beenakker e A. A. M. Staring, *Single Charge Tunneling, NATO Advanced Study Institute, Serie B: Physics*, edited by H. Grabert e M. H. Devoret (Plenum, New York, 1991).
- [23] C. W. J. Beenarkker, Phys. Rev. B **44**, 1646 (1991).
- [24] Y. Meir e N.S. Wingren, Phys. Rev. Lett. **68**, 2512 (1992).
- [25] L. Y. Chen e C.S. Ting, Phys. Rev. B **43**, R4534 (1991).
- [26] B. Wang, J. Wang e H. Guo, J. Appl. Phys. **86**, 5094 (1999).
- [27] P. Sela e Y. Oreg, Phys. Rev. Lett. **96**, 166802 (2006).
- [28] J. Splettstoesser, M. Governale, J. König e R. Fazio, Phys. Rev. Lett. **95**, 246803 (2005).
- [29] J. Splettstoesser, M. Governale, J. König e R. Fazio, Phys. Rev. B **74**, 085305 (2006).
- [30] M. Di Ventra, *Electrical Transport in Nanoscale Systems* (Cambridge University Press, Cambridge, 2008).
- [31] H. Haug e A. P. Jauho, *Quantum Kinetics in Transport and Optics of Semiconductors* (Springer Solid-State Sciences 123, 1996).
- [32] G. D. Mahan, *Many-Particle Physics, Second Edition*.

- [33] J. Rammer e H. Smith, *Rev. Mod. Phys.* **58**, 323 (1986).
- [34] S. Datta, *Electronic Transport in Mesoscopic Systems* (Cambridge University Press, Cambridge, 1995).
- [35] D. C. Langreth, *Linear and Nonlinear Electron Transport in Solids* (Plenum, New York, 1976).
- [36] D. J. Thouless, *Phys. Rev. B* **27**, 6083 (1983).
- [37] P. W. Brouwer, *Phys. Rev. B* **58**, R10135 (1998).
- [38] H. Pothier, P. Lafarge, C. Urbina, D. Esteve e M. H. Devoret, *Europhysics Lett.* **17**, 249 (1992).
- [39] P. W. Brouwer, A. Lamacraft e K. Flensberg, *Phys. Rev. B* **72**, 075316 (2005).
- [40] E. Costa, R. Aguado e G. Platero, *Phys. Rev. Lett.* **94**, 107202 (2005).
- [41] A. R. Hernández, F. A. Pinheiro, C. H. Lewenkopf e E. R. Mucciolo, *Phys. Rev. B* **80**, 115311 (2009).
- [42] A. P. Jauho, N. S. Wingreen e Y. Meir, *Phys. Rev. B* **50**, 5528 (1994).
- [43] P. W. Anderson, *Phys. Rev.* **124**, 41 (1961)
- [44] Para uma descrição detalhada de como obter essa equação veja, por exemplo, Alexis Hernández, **Transporte Eletrônico em Sistemas Mesoscópicos**, tese de doutorado, orientador Raúl Oscar Vallejos, co-orientador Caio Lewenkopf, CBPF (2009).
- [45] E. R. Mucciolo, C. Chamon e C. M. Marcus, *Phys. Rev. Lett.* **89**, 146802 (2002).
- [46] M. Martinez-Mares, C. H. Lewenkopf e E. R. Mucciolo, *Phys. Rev. B* **69**, 085301 (2004).
- [47] M. Governale, F. Tadei e R. Fazio, *Phys. Rev. Lett.* **68**, 155324 (2003).
- [48] S. K. Watson, R. M. Potok, C. M. Marcus e V. Umansky, *Phys. Rev. Lett.* **91**, 258301 (2003).