

TRANSPORTE ELETRÔNICO EM SISTEMAS  
MESOSCÓPICOS

ALEXIS RICARDO HERNÁNDEZ NUÑEZ

CENTRO BRASILEIRO DE PESQUISAS FÍSICAS - CBPF/MCT

Rio de Janeiro, Brasil

2009

Tese de doutoramento submetida ao Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas sob orientação do Prof. **Caio H. Lewenkopf** e co-orientação do Prof. **Raúl O. Vallejos** para a obtenção do título de Doutor em Física por

**Aléxis Ricardo Hernández Nuñez**

2009

# Resumo

Derivamos a fórmula de Landauer, para transporte eletrônico em sistemas mesoscópicos, usando o formalismo de funções de Green fora de equilíbrio. Em seguida extendimos esta descrição para o caso da condutância não linear, o que permitiu aprimorar o nível de aproximação no qual a interação eletrônica era considerada.

Usando um modelo simples de anel quântico calculamos as quantidades envolvidas na descrição de transporte não linear em termos de matrizes de espalhamento: injetividade, emissividade, potências características e a própria condutância não linear  $G^{(2)}$ . Isto nos permitiu estudar as propriedades interferométricas da condutância não linear num anel com dois contatos. Certas simetrias sobre a inversão do campo magnético apresentadas por alguns dos coeficientes da condutância não linear também foram discutidas.

O transporte eletrônico dependente do tempo em pontos quânticos com interação eletrônica foi considerado por meio do formalismo de funções de Green fora de equilíbrio. Considerando a aproximação de campo médio e o regime adiabático foi possível escrever um conjunto de equações que permitem calcular a corrente bombeada num ponto quântico no regime de bloqueio de Coulomb.

# Abstract

The Landauer formula for electronic transport in mesoscopic systems is derived in terms of non-equilibrium Green's functions. In the sequence this description was extended to consider the non-linear regime. The Green's function description allowed us to improve the level of approximation which the electron interactions was considered in the scattering formalism.

Using a single channel model for a quantum ring it was possible to compute the quantities involved in the scattering matrix description of non-linear transport, i.e., injectivities, emissivities, characteristic potentials and the first non-linear correction to the conductance. We study the possibility to do interferometer measurements with the non-linear conductance in a two contact setup. We also address the symmetry properties of non-linear coefficients under magnetic field inversion.

The time dependent electronic transport in interacting quantum dots is considered by using non-equilibrium Green's functions. Assuming the quantum dot to be in the Coulomb blockade regime and the time variation to be adiabatic, it was possible to write a system of equations which give us the pumped current as a function of time in such system.

# Conteúdo

<b>1</b>	<b>Introdução</b>	<b>1</b>
<b>2</b>	<b>Formalismo de Keldysh para pontos quânticos.</b>	<b>4</b>
2.1	Hamiltoniano do modelo . . . . .	4
2.2	Relação entre a corrente e as funções de Green. . . . .	7
2.3	Função de Green da região central. . . . .	10
2.4	A condutância . . . . .	13
2.4.1	Conexão com a matriz de espalhamento. . . . .	15
<b>3</b>	<b>Transporte quântico não linear</b>	<b>17</b>
3.1	Abordagem em termos de matrizes de espalhamento . . . . .	17
3.2	Abordagem em termos de funções de Green. . . . .	20
3.2.1	Coefficiente linear da condutância. . . . .	22
3.2.2	Coefficiente de segunda ordem da condutância. . . . .	24
3.2.3	Ordens superiores. . . . .	26
3.3	Conexão entre os dois formalismos. . . . .	28
3.4	Implementação da aproximação de Hartree-Fock no FFG. . . . .	30
<b>4</b>	<b>Condutância de um anel de Aharonov-Bohm</b>	<b>32</b>
4.1	Resultados experimentais de interesse. . . . .	32
4.2	Modelo do anel quântico . . . . .	36
4.3	Injetividade e emissividade . . . . .	40
4.4	Potenciais característicos . . . . .	41
4.5	Condutância não linear $G^{(2)}$ . . . . .	43
4.6	Anel assimétrico. . . . .	45
4.7	Rigidez de fase. . . . .	46
4.8	Potenciais característicos de segunda ordem $u_{\alpha\beta}$ . . . . .	48

4.9	Discussão dos resultados. . . . .	49
<b>5</b>	<b>Bombeamento quântico de elétrons.</b>	<b>52</b>
5.1	Modelo . . . . .	53
5.2	Corrente num ponto quântico com interação e dependência temporal. . .	54
5.2.1	Definição da corrente. . . . .	55
5.2.2	Expressão da corrente em termos da função de Green do ponto quântico. . . . .	56
5.3	Determinando a função de Green do ponto quântico . . . . .	57
5.3.1	Aproximação de campo médio. . . . .	58
5.3.2	Solução formal das equações de movimento . . . . .	59
5.4	Regime Adiabático . . . . .	60
5.4.1	Reparametrização das funções de Green . . . . .	61
5.4.2	Calculo auto-consistente de $G_{ss}^{(0)}(\omega, \bar{t})$ . . . . .	64
5.4.3	Cálculo auto-consistente de $G_{ss}^{(1)}(\omega, \bar{t})$ . . . . .	66
5.4.4	Expressão da corrente na aproximação adiabática . . . . .	67
<b>6</b>	<b>Conclusões</b>	<b>69</b>
<b>A</b>	<b>Limite ao caso não interagente.</b>	<b>71</b>

# Lista de Figuras

2.1	Representação esquemática de um condutor mesoscópicos. . . . .	5
2.2	Contorno de Keldysh . . . . .	8
4.1	(a) Imagem do anel quântico. (b) Parte não linear da curva característica $I - V$ do anel. . . . .	33
4.2	(a) Coeficientes da condutância. (b) Rigidez de fase. . . . .	34
4.3	Gráfica experimental da fase observada como função das voltagens de porta $V_{PG}$ . . . . .	35
4.4	Representação esquemática do anel quântico. . . . .	37
4.5	Amplitudes de probabilidade de transmissão e reflexão. . . . .	39
4.6	Condutância linear . . . . .	39
4.7	Injetividades. . . . .	41
4.8	Emissividades. . . . .	41
4.9	Potenciais característicos, $u_1(x) - u_2(x)$ . . . . .	42
4.10	Primeira correção não linear, $G^{(2)}$ . . . . .	43
4.11	Simetria de reflexão. . . . .	44
4.12	Primeira correção não linear, $G^{(2)}$ , para um anel assimétrico. . . . .	45
4.13	Curvas de $G^{(2)}$ para vários valores da fase introduzida. . . . .	46
4.14	$G^{(2)}$ como função do fluxo magnético e da fase introduzida. . . . .	47
4.15	Fase observada como função da fase introduzida. . . . .	48
4.16	Potencial característico de segunda ordem. . . . .	50
5.1	Representação esquemática do bombeamento de elétrons em um ponto quântico. . . . .	55
5.2	Gráfica de $\langle n_{\bar{s}}^0(\bar{t}) \rangle$ . . . . .	65

# Capítulo 1

## Introdução

O desenvolvimento da capacidade de produção e caracterização de amostras, junto com as melhorias consideráveis nos campos da micro-eletrônica e da criogenia, tem aberto inúmeras possibilidades no que diz respeito à exploração do mundo quântico. Dentre as variadas opções, o estudo do transporte eletrônico em sistemas nanoscópicos tem se constituído numa das principais formas de explorar tais possibilidades, tornando-se assim em um dos tópicos mais importantes da nanociência. Do ponto de vista fundamental a pesquisa nesta área é orientada a melhorar o nosso entendimento dos sistemas quânticos. Já de um ponto de vista mais aplicado, o conhecimento adquirido, será sem dúvida de muita utilidade no desenvolvimento de novos nano-dispositivos.

No que tange à teoria, a bem sucedida fórmula de Landauer [1, 2, 3, 4], proporcionou as bases para descrever uma ampla variedade de fenômenos. Esta fórmula traduz a idéia de que condutância (quântica) é equivalente à transmissão (quântica). Isto é uma excelente aproximação para processos dominados pela física de partículas independentes. Porém, experimentos recentes envolvendo: interação eletrônica (correlação) [5], processos inelásticos [6], dependência temporal [7] e transporte não linear [8], entre outros, requerem de um tratamento mais abrangente.

O formalismo de funções de Green fora do equilíbrio, ou formalismo de Keldysh, nos proporciona uma ferramenta de trabalho onde os novos fenômenos apresentam uma descrição mais natural. Ademais, o formalismo de Keldysh tem a vantagem de nos permitir empregar inúmeras ferramentas próprias da teoria de campos.

O transporte quântico eletrônico não-linear em dispositivos nanoscópicos tem apresentado um crescente interesse tanto no âmbito experimental [9, 10, 11, 12, 13, 14, 15] quanto no teórico [16, 17, 18, 19, 20, 21, 22]. Experimentos em semicondutores

mesoscópicos, como por exemplo pontos quânticos [9, 10, 11] e anéis de Aharonov-Bohm [12, 13], tem-se focalizado na investigação dos efeitos de retificação e na violação das relações de reciprocidade de Onsager-Casimir. Estudos similares também tem sido realizados em nanotubos de carbono [14]. Igualmente, o transporte não linear tem sido de grande interesse em eletrônica molecular [15], onde os experimentos tem enfatizado a possibilidade de usar moléculas como diodos, transistores ou interruptores. Já no âmbito teórico, o transporte eletrônico não-linear tem apresentado avanços significativos no que diz respeito a processos elásticos. Tais avanços tem se realizado por meio de ambos formalismos, o de matrizes de espalhamento (Landauer) [16, 17, 18, 19, 23], e o formalismo de funções de Green (Keldysh) [20, 21, 22, 24].

Por sua vez, o bombeamento adiabático de elétrons em sistemas não interagentes foi considerado pelo Brouwer [25], que usando o formalismo de matrizes de espalhamento demonstrou que a corrente bombeada é proporcional à frequência de bombeamento. Esta descrição também tem sido utilizada para estudar aspectos como: o rol de simetrias discretas na corrente bombeada [26], o efeito de espalhamentos inelásticos e da descoerência [27, 28], o papel do ruído e da dissipação [29], os efeitos de interferências de Andreev na presença de fios super-condutores [30, 31] e o bombeamento de spin [32, 33, 34]. O fenômeno de bombeamento em sistemas não interagentes também tem sido tratado usando uma abordagem baseada na solução iterativa dos estados dependentes do tempo [35]. Ademais, a teoria de matrizes aleatórias foi usada com certo sucesso na descrição de bombeamento adiabático de cargas e do efeito fotovoltaico em sistemas sem interação [36].

Experimentalmente, a primeira implementação do bombeamento de elétrons foi conseguida por Pothier et al., que observaram uma carga quantizada devida ao fenômeno de bloqueio de Coulomb [37]. Já o bombeamento de elétrons não quantizado foi observado em pontos quânticos abertos e reportado na Ref. [38]. Mais recentemente, foi implementado o bombeamento de spin [39].

Voltando à teoria, o bombeamento em sistemas com interação, tem sido bem menos estudado. Usando a descrição em termos de bósons escravos e a aproximação de campo médio, Aono evidenciou a separação entre o spin e a carga no bombeamento adiabático no regime de Kondo [40]. O bombeamento quântico foi estudado também nos regimes aberto [41] e de bloqueio de Coulomb [42, 43]. Mais recentemente, técnicas de funções de Green fora de equilíbrio tem sido utilizadas para estudar o bombeamento adiabático em pontos quânticos com interação: no limite  $U \rightarrow \infty$  [44, 45], e no limite de acoplamento

fraco do ponto quântico aos fios [46].

Esta tese tem por finalidade usar tanto o formalismo de Landauer quanto o de Keldysh para estudar diferentes fenômenos de transporte quântico de elétrons, mais especificamente estaremos abordando o transporte não linear em anéis de Aharonov-Bohm e o bombeamento de elétrons em pontos quânticos no regime de bloqueio coulombiano.

No capítulo 2 rederivamos a fórmula de Landauer usando o formalismo de funções de Green fora do equilíbrio e o método das equações de movimento. Este capítulo serve para apresentarmos as bases para os desenvolvimentos que se seguem.

O capítulo 3 começa por descrever o formalismo desenvolvido por Büttiker e colaboradores para tratar o transporte eletrônico não linear. A seguir, introduzimos a contrapartida deste formalismo em termos de funções de Green fora do equilíbrio. Por último, ilustramos a potencial do novo formalismo, considerando a interação eletrônica num melhor nível de aproximação.

No capítulo 4 utilizamos as ferramentas desenvolvidas no capítulo anterior para fazer contato com os resultados de um experimento particular. O experimento em questão estuda a condutância não linear num anel de Aharonov-Bohm conectado a dois contatos. Para tal fim, usamos o formalismo de matrizes de espalhamento e um modelo simples para o anel quântico. Em particular centramos nossa discussão na violação das relações de Onsager bem como na possibilidade de usar este sistema como interferômetro.

Para finalizar, no capítulo 5 apresentamos uma abordagem teórica que nos permite descrever, usando funções de Green, o bombeamento adiabático de elétrons em pontos quânticos no regime de bloqueio de Coulomb.

# Capítulo 2

## Formalismo de Keldysh para pontos quânticos.

Neste capítulo será descrito o formalismo de funções de Green fora do equilíbrio (NEGF), através do qual é possível calcular a condutância em sistemas mesoscópicos. Posteriormente apresentaremos uma comparação entre os resultados obtidos com este formalismo e os obtidos através do formalismo de matrizes de espalhamento [47].

### 2.1 Hamiltoniano do modelo

Para construir o nosso modelo é preciso decompor o sistema em duas partes: uma região central onde os elétrons interagem, e os fios que conectam esta região aos reservatórios. Isto é representado na Fig. (2.1). Feito isto, o hamiltoniano do sistema é composto por três termos

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_L + \mathcal{H}_C + \mathcal{H}_{LC}. \quad (2.1)$$

O hamiltoniano que descreve os elétrons nos fios é dado por

$$\mathcal{H}_L = \sum_{kas} \varepsilon_{kas} c_{kas}^\dagger c_{kas}, \quad (2.2)$$

onde os canais nos fios são descritos por  $a = (\alpha, n)$ , onde  $n = 1, \dots, N_\alpha$  especifica o modo transversal (canal) no fio  $\alpha = 1, \dots, N$ . A energia do modo transversal  $n$  no fio  $\alpha$  ( $\varepsilon_{as}$ ) define o limiar de energia no qual o canal é aberto. Assumindo que a propagação ao longo dos fios é livre se tem  $\varepsilon_{kas} = \varepsilon_{as} + \hbar^2 k^2 / 2m^*$ , com  $m^*$  a massa efetiva do elétron e  $k$  o número de onda longitudinal. O spin do elétron é representado por  $s = \uparrow, \downarrow$  e  $c_{kas}^\dagger$  ( $c_{kas}$ ) são operadores fermiônicos de criação (aniquilação), que seguem

a regra de anticomutação  $\{c_{kas}^\dagger, c_{k'a's'}\} = \delta_{aa'}\delta_{ss'}\delta_{kk'}$ . Os elétrons no fio  $\alpha$  estão em equilíbrio térmico com o reservatório ao qual ele está conectado, caracterizado pela temperatura  $T$  e pelo potencial químico  $\mu_\alpha$ . É costumeiro escolher as temperaturas dos reservatórios todas iguais, mas isto não é necessário, em particular no estudo de transporte de calor a escolha de temperaturas diferentes é responsável pela situação de desequilíbrio na região central. Em algumas situações é conveniente modelar os fios como cadeias semi-infinitas de tipo “tight-binding” [3, 48], ou através de representações realistas da estrutura atômica em questão. Esta última opção é utilizada em eletrônica molecular, onde os fios são modelados como redes periódicas semi-infinitas de átomos [24, 49, 50, 51, 52]. Independente de qual seja a descrição utilizada para os fios, a decomposição feita na Eq. (2.1) é útil sempre que a dinâmica dos fios for “simples”, isto é, quando for possível definir modos de propagação assintóticos para a transmissão de elétrons entre os reservatórios e a região central. Em pontos quânticos, os fios são associados a contatos pontuais que certamente são bem diferentes de fios semi-infinitos. Porém, pode-se mostrar que, se os fios forem suficientemente longos para que a contribuição de modos evanescentes seja desprezível, o modelo é completamente justificado (ver, por exemplo, apêndice C da Ref. [53]).

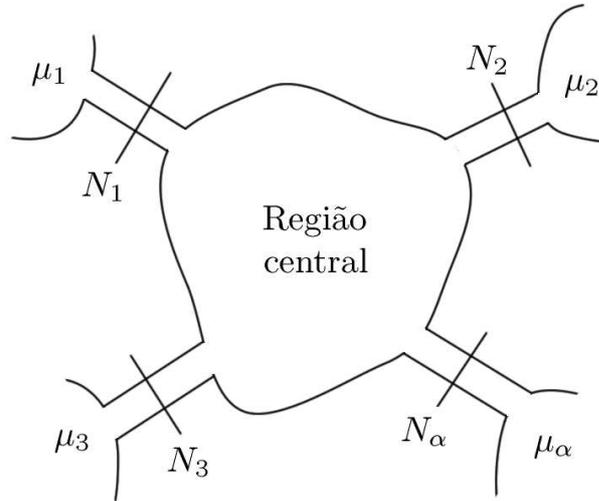


Figura 2.1: Visualização esquemática do condutor conectado aos fios  $\alpha = 1, \dots, N$ . Cada fio é por sua vez conectado a um reservatório de potencial químico  $\mu_\alpha$  e possui  $N_\alpha$  canais abertos (modos propagantes).

O hamiltoniano da região central é

$$\mathcal{H}_C = \sum_{\mu\nu} [H_C]_{\mu\nu} d_{\mu s}^\dagger d_{\nu s}, \quad (2.3)$$

onde  $d_{\mu s}^\dagger$  ( $d_{\mu s}$ ) cria (aniquila) um elétron no estado  $\mu$  de uma base qualquer da região central. Como  $\mathcal{H}_C$  é bilinear, as interações elétron-elétron são tomadas em consideração só na aproximação de campo médio. Isto simplifica enormemente o cálculo da condutância. Porém tal aproximação não descreve processos de flutuação de carga nem correlações eletrônicas, o que exclui o tratamento de fenômenos como o bloqueio Coulombiano e o efeito Kondo. Em vista destas limitações, é natural questionar a utilidade real deste modelo. A resposta, obtida através do estudo de correlações eletrônicas fortes [54, 55, 56], é que o modelo é realista, desde que o condutor esteja bem acoplado a vários modos em cada fio. A grosso modo, isto implica que a condutância seja maior do que  $2e^2/h$ . O hamiltoniano  $\mathcal{H}_C$  também exclui processos inelásticos. Esta é uma limitação do modelo, e não do formalismo de funções de Green, como se pode constatar na Ref. [57].

Note que escolhemos não usar uma representação diagonal para  $\mathcal{H}_C$ . Isto facilitará o mapeamento na linguagem de matrizes de espalhamento (Seção 2.4.1) e conseqüentemente a identificação da fórmula de Landauer. Além disso, as representações não diagonais são frequentes em eletrônica molecular. Nos modelos tight-binding, a escolha de uma representação não diagonal é natural: os estados da base correspondem a sítios na cadeia, e os termos não diagonais do hamiltoniano representam a conexão entre os sítios. Métodos mais elaborados, como "Density Functional Theory" (DFT) [58], usados em eletrônica molecular, precisam de uma hipótese a mais [24, 49, 50, 51], a saber: os orbitais de Kohn-Sham devem ser identificados com os orbitais de partícula independente da Eq. (2.3) [59].

Até agora o nosso modelo é composto por fios em equilíbrio térmico com o reservatório correspondente e uma região central isolada. O acoplamento entre estes dois subsistemas é introduzido através do hamiltoniano de contato, que é dado por

$$\mathcal{H}_{LC} = \sum_{ka,\mu,s} \left[ V_{ka,\mu} c_{kas}^\dagger d_{\mu s} + \text{H.c.} \right]. \quad (2.4)$$

Em pontos quânticos os elementos de matriz  $V_{ka,\mu}$ , que descrevem o acoplamento entre os fios e a região central, são considerados parâmetros livres. Em eletrônica molecular os  $V_{ka,\mu}$  são determinados pela superposição entre as funções de onda da região central (a molécula) e dos fios (eletrodos) [24, 60]. Neste caso, para calcular a condutância é

necessário determinar com precisão as caudas da função de onda da molécula que penetra na região dos fios.

Na presença de uma diferença entre os potenciais químicos  $\mu_\alpha$  dos reservatórios, o sistema sai do equilíbrio e uma corrente eletrônica flui. Quando o regime estacionário é alcançado, um potencial eletrostático auto-consistente  $U(\mathbf{r})$  é estabelecido. O potencial  $U(\mathbf{r})$  é levado em consideração no cálculo de  $\mathcal{H}_C$ , e depende do potencial químico dos reservatórios e das propriedades do material. Em situações próximas do equilíbrio a separação em fios e região central é um pouco arbitrária, no entanto, à medida em que a diferença de potencial aplicada aumenta, os fios são definidos como a região onde não existe uma queda de potencial apreciável, isto é, onde  $U(\mathbf{r}) - U_{\text{eq}}(\mathbf{r})$  é constante. Aqui  $U_{\text{eq}}(\mathbf{r})$  é o potencial eletrostático na ausência de diferença de potencial.

## 2.2 Relação entre a corrente e as funções de Green.

Nesta seção derivaremos uma expressão para a corrente em termos da função de Green da região central. Para isto, é necessário apenas tratar os elétrons na região dos fios como não interagentes. Para simplificar a discussão, assumiremos que o campo magnético externo é nulo. Assim, na aproximação de campo médio, o spin dos elétrons não desempenha nenhum papel. A corrente no fio  $\alpha$  é dada por

$$I_\alpha(t) = -2e \left\langle \frac{d}{dt} \mathcal{N}_\alpha(t) \right\rangle \quad (2.5)$$

onde  $e$  é a carga do elétron, o fator 2 dá conta das duas projeções de spin, e  $\langle \dots \rangle$  representa a média térmica. O operador de número de elétrons é

$$\mathcal{N}_\alpha(t) = \sum_{n=1}^{N_\alpha} \sum_k c_{k\alpha n}^\dagger(t) c_{k\alpha n}(t). \quad (2.6)$$

Note que  $a$  foi substituído por  $(\alpha, n)$  e o índice de spin foi omitido. A equação de movimento

$$\frac{d}{dt} \mathcal{N}_\alpha(t) = \frac{i}{\hbar} [\mathcal{H}, \mathcal{N}_\alpha(t)] \quad (2.7)$$

nos leva a

$$I_\alpha(t) = \frac{2ie}{\hbar} \sum_{nk,\mu} [V_{k\alpha n,\mu} \langle c_{k\alpha n}^\dagger(t) d_\mu(t) \rangle - \text{H.c.}] . \quad (2.8)$$

Introduzindo as funções de Green menor  $G^<$  (do inglês lesser) [61, 62]

$$G_{\mu,k\alpha n}^<(t, t') \equiv \frac{i}{\hbar} \langle c_{k\alpha n}^\dagger(t') d_\mu(t) \rangle, \quad \text{e} \quad G_{k\alpha n,\mu}^<(t, t') \equiv \frac{i}{\hbar} \langle d_\mu^\dagger(t') c_{k\alpha n}(t) \rangle \quad (2.9)$$

chegamos a

$$I_\alpha(t) = 4e \operatorname{Re} \left\{ \sum_{nk,\mu} V_{k\alpha n,\mu} G_{\mu,k\alpha n}^<(t,t) \right\}. \quad (2.10)$$

Neste capítulo estamos interessados em processos de transporte estacionários, onde nem  $\mathcal{H}$  nem  $\mu_\alpha$  dependem explicitamente do tempo. Portanto, todas as funções de Green apresentam um único argumento temporal, isto é:  $G(t,t') \rightarrow G(t-t')$ .

O tratamento perturbativo padrão para sistemas de muitos corpos em equilíbrio [61, 62] é baseado na incorporação e remoção adiabática da interação, e no cálculo de valores esperados de processos ordenados temporalmente. Os estados inicial ( $t \rightarrow -\infty$ ) e final ( $t \rightarrow +\infty$ ) correspondem a uma dinâmica sem interação e encontram-se em equilíbrio. Isto faz sentido considerando que, em equilíbrio, o estado inicial e final são essencialmente idênticos (Teorema de Feynman e Low). Porém, em processos fora do equilíbrio, como é o caso do transporte, o sistema não necessariamente retorna ao estado de equilíbrio termodinâmico inicial depois de ter sido desligada a interação. Sem o Teorema de Feynman e Low, não é possível escrever a função de Green em termos de integrais ordenadas temporalmente, apropriadas para o uso do teorema de Wick. No entanto, fazendo uma continuação analítica da função de Green no plano complexo, é possível definir um contorno de integração no qual se tem um ordenamento “temporal”, que preserva a estrutura da expansão perturbativa. Isto significa que todas as expressões obtidas para as funções de Green em equilíbrio são recuperadas para a situação de não equilíbrio, com a diferença que as integrais temporais estão definidas no contorno ilustrado na Fig. (2.2). Finalmente, o tratamento destas integrais é feito através das regras de Langreth [63, 64]. Uma vantagem da função de Green ordenada no contorno é que ela contém toda a informação necessária para a descrição do transporte.

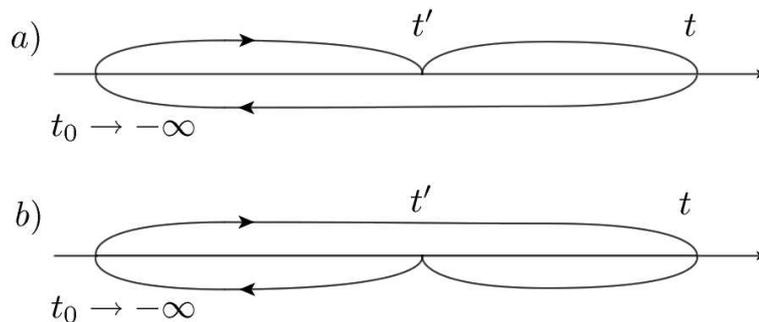


Figura 2.2: Contorno de integração para as funções de Green fora do equilíbrio. Sendo que em a)  $t$  é prévio a  $t'$  e em b) vice-versa.

O formalismo de Keldysh nos permite obter uma expressão fechada para  $G^<$  da Eq. (2.10). A derivação é padrão [61, 65, 66] e é composta por duas etapas. Primeiro, se resolve a equação de movimento para funções de Green ordenadas temporalmente. Depois, são empregadas as regras de Langreth para chegar na expressão final.

Começemos por definir a função de Green de contacto ordenada temporalmente:

$$G_{\mu,k\alpha n}(t-t') = -\frac{i}{\hbar} \left\langle T \left( d_{\mu}(t) c_{k\alpha n}^{\dagger}(t') \right) \right\rangle. \quad (2.11)$$

Tal definição satisfaz a seguinte equação de movimento

$$\left( -i\hbar \frac{\partial}{\partial t'} - \varepsilon_{k\alpha n} \right) G_{\mu,k\alpha n}(t-t') = \sum_{\nu} G_{\mu\nu}(t-t') V_{\nu,k\alpha n}, \quad (2.12)$$

onde

$$G_{\mu\nu}(t-t') \equiv -\frac{i}{\hbar} \left\langle T \left( d_{\mu}(t) d_{\nu}^{\dagger}(t') \right) \right\rangle \quad (2.13)$$

é a função de Green da região central.

Como a propagação nos fios é livre, sua função de Green é dada por

$$\left( -i\hbar \frac{\partial}{\partial t'} - \varepsilon_{k\alpha n} \right) g_{k\alpha n}(t-t') = \delta(t-t'), \quad (2.14)$$

com  $g$  diagonal. Combinando as Eqs. (2.12) e (2.14), escrevemos

$$G_{\mu,k\alpha n}(t-t') = \sum_{\nu} \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 G_{\mu\nu}(t-t_1) V_{\nu,k\alpha n} g_{k\alpha n}(t_1-t'). \quad (2.15)$$

Implementando a continuação analítica no contorno de Keldysh e com ajuda das regras de Langreth [63, 64] finalmente obtemos

$$G_{\mu,k\alpha n}^{<}(t-t') = \sum_{\nu} \int_{-\infty}^{+\infty} dt_1 V_{\nu,k\alpha n} \left\{ G_{\mu\nu}^r(t-t_1) g_{k\alpha n}^{<}(t_1-t') + G_{\mu\nu}^{<}(t-t_1) g_{k\alpha n}^a(t_1-t') \right\} \quad (2.16)$$

e

$$G_{\mu,k\alpha n}^{a(r)}(t-t') = \sum_{\nu} \int_{-\infty}^{+\infty} dt_1 V_{\nu,k\alpha n} G_{\mu\nu}^{a(r)}(t-t_1) g_{k\alpha n}^{a(r)}(t_1-t'), \quad (2.17)$$

com  $g^{<}$  e  $g^{a(r)}$  dados por [61]

$$g_{k\alpha n}^{<}(t-t') = \frac{i}{\hbar} f_{\alpha}(\varepsilon_{k\alpha n}) e^{-i\varepsilon_{k\alpha n}(t-t')/\hbar}, \quad (2.18)$$

$$g_{k\alpha n}^r(t-t') = -\frac{i}{\hbar} \theta(t-t') e^{-i\varepsilon_{k\alpha n}(t-t')/\hbar}, \quad (2.19)$$

$$g_{k\alpha n}^a(t-t') = \frac{i}{\hbar} \theta(t'-t) e^{-i\varepsilon_{k\alpha n}(t-t')/\hbar}, \quad (2.20)$$

sendo  $f_\alpha(\varepsilon) = [e^{\beta(\varepsilon - \mu_\alpha)} + 1]^{-1}$  a função de Fermi do  $\alpha$ -ésimo fio, com potencial químico  $\mu_\alpha$ . É conveniente escrever  $\mu_\alpha = \mu_{\text{eq}} - eV_\alpha$ , onde  $V_\alpha$  é a voltagem aplicada no  $\alpha$ -ésimo contato.

Substituindo as Eqs. (2.16), (2.18) e (2.20) na Eq. (2.10), podemos escrever a corrente como

$$I_\alpha(t) = \frac{4e}{\hbar} \text{Im} \left\{ \sum_{\mu\nu} \sum_{kn} \int_{-\infty}^{\infty} dt' V_{\nu, k\alpha n} V_{k\alpha n, \mu} e^{-i\varepsilon_{k\alpha n}(t-t')/\hbar} \right. \\ \left. \times [f_\alpha(\varepsilon_{k\alpha n}) G_{\mu\nu}^r(t-t') + G_{\mu\nu}^<(t-t')\theta(t-t')] \right\}. \quad (2.21)$$

Note que a corrente é expressa unicamente em termos da função de Green da região central.

## 2.3 Função de Green da região central.

Nesta seção nos dedicaremos ao cálculo das funções de Green, retardada  $G_{\mu\nu}^r$  e a função de correlação  $G_{\mu\nu}^<$ , da região central. Novamente, o primeiro passo consiste em escrever a equação de movimento para a função de Green ordenada temporalmente

$$\sum_{\nu'} \left( i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \delta_{\mu\nu'} - [H_C]_{\mu\nu'} \right) G_{\nu'\nu}(t-t') = \delta_{\mu\nu} \delta(t-t') + \sum_{k\alpha n} V_{\mu, k\alpha n} G_{k\alpha n, \nu}(t-t'), \quad (2.22)$$

Poderíamos agora proceder como antes, transformando a equação de movimento em uma equação integral em tempo real, fazendo a continuação analítica para o contorno de Keldysh e usando as regras de Langreth. Porém, existe uma forma mais simples de calcular as funções de Green retardada e avançada, já que elas estão diretamente relacionadas com a ordenada temporalmente segundo

$$G^{r(a)}(\varepsilon) = \int_{-\infty}^{\infty} dt \exp(i\varepsilon(\pm)t/\hbar) G(t) \quad (2.23)$$

onde  $\varepsilon^\pm = \varepsilon \pm i0^+$ . Fazendo a transformada de Fourier da Eq. (2.22) obtemos

$$\sum_{\nu'} (\varepsilon^\pm \delta_{\mu\nu'} - [H_C]_{\mu\nu'}) G_{\nu'\nu}^{r(a)}(\varepsilon) = \delta_{\mu\nu} + \sum_{k\alpha n} V_{\mu, k\alpha n} G_{k\alpha n, \nu}^{r(a)}(\varepsilon). \quad (2.24)$$

A função de Green de contato  $G_{k\alpha n, \nu}^{r(a)}(\varepsilon)$  é obtida fazendo a transformada da Eq. (2.17)

$$G_{k\alpha n, \mu}^{r(a)}(\varepsilon) = g_{k\alpha n}^{r(a)}(\varepsilon) \sum_{\nu} V_{k\alpha n, \nu} G_{\nu, \mu}^{r(a)}(\varepsilon). \quad (2.25)$$

Inserindo  $G_{k\alpha n, \mu}^{r(a)}$  na Eq. (2.24), chegamos ao conjunto de equações

$$\sum_{\nu'} \left[ \varepsilon \delta_{\mu\nu'} - [H_C]_{\mu\nu'} - \Sigma_{\mu\nu'}^{r(a)}(\varepsilon) \right] G_{\nu'\nu}^{r(a)}(\varepsilon) = \delta_{\mu\nu} , \quad (2.26)$$

onde introduzimos a auto-energia

$$\Sigma_{\mu\nu}(\varepsilon) \equiv \sum_{k\alpha n} V_{\mu, k\alpha n} g_{k\alpha n}(\varepsilon) V_{\nu, k\alpha n}^* , \quad (2.27)$$

$\Sigma^{r(a)}$  (ou  $\Sigma^<$ ) são obtidos identificando  $g_{k\alpha n}$  com  $g_{k\alpha n}^{r(a)}$  (ou  $g_{k\alpha n}^<$ ). É conveniente substituir a soma em  $k$  por uma integral em energia. Para isto definimos  $V_{\mu, pn}(\varepsilon_{k\alpha n}) \equiv V_{\mu, k\alpha n}$  e usamos a identidade [67]  $(\varepsilon^\pm - \varepsilon)^{-1} = \mp i\pi\delta(\varepsilon - \varepsilon) + \text{PV}(\varepsilon - \varepsilon)^{-1}$ , com o qual obtemos

$$\Sigma_{\mu\nu}^{r(a)}(\varepsilon) = \pm i\pi \sum_{\alpha n} \rho_{\alpha n}(\varepsilon) V_{\mu, \alpha n}(\varepsilon) V_{\nu, \alpha n}^*(\varepsilon) + \text{PV} \sum_{\alpha n} \int_{\varepsilon_{\alpha n}}^{\infty} d\varepsilon \rho_{\alpha n}(\varepsilon) V_{\mu, \alpha n}(\varepsilon) \frac{1}{\varepsilon - \varepsilon} V_{\nu, \alpha n}^*(\varepsilon) . \quad (2.28)$$

Aqui  $\varepsilon_{\alpha n}$  é o limiar de energia para abrir o  $n$ -ésimo modo de propagação no fio  $\alpha$ ,  $\rho_{\alpha n}(\varepsilon)$  é a densidade de estados neste modo, e PV indica que é preciso tomar o valor principal da integral. Os fios são modelados como guias de ondas retangulares, onde os elementos de matriz de acoplamento  $V_{\mu, \alpha n}(\varepsilon)$  são funções suaves de  $\varepsilon$ . Neste modelo, o valor principal da integral produz uma contribuição desprezível para  $\Sigma_{\mu\nu}^{r(a)}(\varepsilon)$ , exceto para valores de  $\varepsilon$  próximos do limiar de energia  $\varepsilon_{\alpha n}$ . Desta forma, a auto-energia fica independente da energia, e se lê

$$\Sigma_{\mu\nu}^{r(a)} \approx \pm \frac{i}{2} \Gamma_{\mu\nu} , \quad (2.29)$$

onde  $\Gamma_{\mu\nu} \equiv \sum_{\alpha} [\Gamma_{\alpha}]_{\mu\nu}$  e

$$[\Gamma_{\alpha}]_{\mu\nu} = 2\pi \sum_n \rho_{\alpha n} V_{\mu, \alpha n} V_{\nu, \alpha n}^* . \quad (2.30)$$

Esta aproximação muito útil (*aproximação de banda larga*) é pertinente em muitas situações de interesse. Em particular, considerar os elementos da matriz de acoplamento  $V_{\mu, \alpha n}$  independentes da energia é usualmente uma boa aproximação para descrever transporte eletrônico em pontos quânticos a baixa temperatura, uma vez que (como irá se ver posteriormente) a condutância é dominada pelos estados mais próximos do nível de Fermi. Tal aproximação é também freqüentemente empregada para descrever barreiras de tunelamento assimétricas assim como, por exemplo, sistemas de tunelamento ressonante em presença de diferenças de potencial grandes. A idéia principal é que a parte real da auto-energia só renormaliza a posição do pólo, enquanto que a parte imaginária descreve o processo de decaimento ou o vazamento eletrônico para fora da região central

(ver discussão na Ref. [67]). Em contraste, quando a estrutura atômica do contato é relevante a auto-energia  $\Sigma^{r(a)}$  depende de  $\varepsilon$ . Nestes casos é preciso calcular a auto-energia  $\Sigma_{\mu\nu}^{r(a)}(\varepsilon)$ , através de técnicas de dizimação [68] ou por algum outro método [52].

O resultado final para  $G_{\mu\nu}^{r(a)}$  é melhor representado em forma matricial

$$\mathbf{G}^{r(a)}(\varepsilon) = \left( \varepsilon \mathbf{I} - \mathbf{H}_C \pm \frac{i}{2} \mathbf{\Gamma} \right)^{-1}, \quad (2.31)$$

onde  $\mathbf{I}$  é a matriz identidade.

Agora passaremos ao cálculo da função de Green  $G^<$ . Apesar de em geral ser mais difícil, algumas vezes é possível evitar o cálculo explícito de  $G^<$ . Em particular, para o modelo de Anderson com uma ressonância acoplada a fios com só um canal de transmissão, Meir e Wingreen [65] desenvolveram um procedimento que faz uso da conservação da corrente para eliminar  $G^<$  da Eq. (2.21). Para adaptar este método ao caso de múltiplas ressonâncias, é preciso que  $[\Gamma_\alpha]_{\mu\nu} = \lambda [\Gamma_\beta]_{\mu\nu}$ , com  $\lambda$  constante. Porém, salvo no caso de sistemas invariantes mediante o intercâmbio dos fios  $p$  e  $q$ , a suposição de acoplamentos proporcionais para o caso de múltiplas ressonâncias é pouco razoável.

Para um modelo com hamiltoniano bilinear, como o considerado aqui, o cálculo de  $G^<$  é simples. Usando a expressão exata para  $\Sigma_{\mu\nu}(\varepsilon)$ , Eq. (2.27), pode-se obter  $G^<$  diretamente da equação de Dyson [61]:

$$\mathbf{G}^<(\varepsilon) = \mathbf{G}^r(\varepsilon) \mathbf{\Sigma}^<(\varepsilon) \mathbf{G}^a(\varepsilon) \quad (2.32)$$

onde  $\mathbf{\Sigma}^<$  é obtido a partir da Eq. (2.27)

$$\Sigma_{\mu\nu}^<(\varepsilon) = \sum_{\alpha=1}^N \sum_{kn} V_{\mu,k\alpha n} g_{k\alpha n}^<(\varepsilon) V_{\nu,k\alpha n}^* \equiv \sum_{\alpha=1}^N [\Sigma_\alpha^<(\varepsilon)]_{\mu\nu}. \quad (2.33)$$

Seguindo os mesmos passos usados para obter a Eq. (2.29) escrevemos

$$\Sigma_\beta^<(\varepsilon) = i f_\beta(\varepsilon) \mathbf{\Gamma}_\beta. \quad (2.34)$$

Finalmente, juntando os resultados, obtemos

$$\mathbf{G}^<(\varepsilon) = i \sum_{\beta=1}^N f_\beta(\varepsilon) \mathbf{G}^r(\varepsilon) \mathbf{\Gamma}_\beta \mathbf{G}^a(\varepsilon). \quad (2.35)$$

A função de Green  $\mathbf{G}^<(\varepsilon)$  nos permite calcular a densidade eletrônica

$$n(\mathbf{r}) = -i\hbar \int d\varepsilon / (2\pi) G^<(\varepsilon, \mathbf{r}). \quad (2.36)$$

Esta importante relação nos proporciona uma forma natural para calcular o potencial eletrostático  $U(\mathbf{r})$ , que será de grande utilidade quando abordarmos o transporte não linear.

Com estes elementos, estamos prontos para voltar à Eq. (2.21) e calcular a corrente.

## 2.4 A condutância

Retomando a Eq. (2.21), comecemos por transformar a soma sobre  $k$  em uma integral em energia, tal como foi feito para a auto-energia  $\Sigma$ . Integrando em  $t$  obtém-se

$$I_\alpha = -\frac{2e}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\varepsilon}{2\pi} \text{ImTr} \left\{ \mathbf{\Gamma}_\alpha [\mathbf{G}^<(\varepsilon) + f_\alpha(\varepsilon) \mathbf{G}^r(\varepsilon)] \right\}. \quad (2.37)$$

No equilíbrio, os potenciais químicos nos contatos são iguais, isto é:  $\mu_\beta = \mu_{\text{eq}}$  para  $\beta = 1, \dots, N$ . O teorema de flutuação-dissipação estabelece que  $\mathbf{G}^< = -f_{\text{eq}}(\varepsilon) \text{Im} \mathbf{G}^r$  [61], com  $f_{\text{eq}}(\varepsilon) = [e^{\beta(\varepsilon - \mu_{\text{eq}})} + 1]^{-1}$ , o que nos permite verificar que em equilíbrio a corrente é nula, como fisicamente esperado.

Introduzindo  $\mathbf{G}^r$  da Eq. (2.31) e  $\mathbf{G}^<$  da Eq. (2.35) na Eq. (2.21) escrevemos a corrente como

$$I_\alpha = \frac{2e}{\hbar} \sum_{\beta=1}^N \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon \left( f_\beta(\varepsilon) - f_\alpha(\varepsilon) \right) \text{Tr} \left[ \mathbf{\Gamma}_\alpha \mathbf{G}^r(\varepsilon) \mathbf{\Gamma}_\beta \mathbf{G}^a(\varepsilon) \right], \quad (2.38)$$

Este é o resultado central deste capítulo. Os primeiros a obter uma equação similar à Eq. (2.38) foram Caroli e colaboradores [69], usando NEGF para estudar a corrente numa junção metal-isolante-metal. Entretanto, no contexto de sistemas mesoscópicos, a Eq. (2.38) foi derivada primeiro por Pastawski [70]. A derivação apresentada aqui segue a linha do artigo de Meir e Wingreen [65], onde limitações da Eq. (2.38) são discutidas e o caso de sistemas fortemente interagentes é tratado.

Definindo a transmissão total do terminal  $\beta$  ao terminal  $\alpha$  a energia  $\varepsilon$  como

$$\mathcal{T}_{\alpha\beta}(\varepsilon) = \text{Tr} \left[ \mathbf{\Gamma}_\alpha \mathbf{G}^r(\varepsilon) \mathbf{\Gamma}_\beta \mathbf{G}^a(\varepsilon) \right] \quad (2.39)$$

a corrente se escreve

$$I_\alpha = \frac{2e}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon \sum_{\beta=1}^N \left[ \mathcal{T}_{\alpha\beta}(\varepsilon) f_\beta(\varepsilon) - \mathcal{T}_{\beta\alpha}(\varepsilon) f_\alpha(\varepsilon) \right]. \quad (2.40)$$

Este resultado é válido para transporte linear, e também para transporte não-linear, desde que o potencial eletrostático presente nas funções de Green seja calculado auto-consistentemente. Isto será discutido em detalhe no capítulo 3.

Note que a equação (2.40) não evidencia o princípio de exclusão de Pauli, já que a corrente depende de  $\sum_{\beta} \mathcal{T}_{\beta\alpha} f_{\alpha}$  e não de  $\sum_{\beta} \mathcal{T}_{\beta\alpha} f_{\alpha}(1 - f_{\beta})$ , como seria o caso numa equação de taxas padrão. Na prática, esta diferença poderia ser notada na presença de um campo magnético externo. Porém, aqui o transporte é completamente coerente e embora cada estado que transmita elétrons do fio  $\alpha$  para o  $\beta$  tenha componentes assintóticas nos dois fios, os elétrons que fluem de  $\alpha$  para  $\beta$  encontrasse em equilíbrio térmico unicamente com o fio “fonte”  $\alpha$ . Uma discussão mais detalhada do assunto, assim como do papel que um campo magnético desempenha sobre os estados nos fios e do transporte inelástico e não coerente pode ser encontrada no livro do Datta [4].

Antes de discutir o regime linear, vamos reescrever a corrente da seguinte forma:

$$I_{\alpha} = -\frac{2e}{h} \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon \sum_{\beta=1}^N f_{\beta}(\varepsilon) T_{\alpha\beta}(\varepsilon) \quad \text{com} \quad T_{\alpha\beta}(\varepsilon) = \text{Tr} \left[ \mathbf{\Gamma}_{\alpha} \mathbf{G}^r(\varepsilon) (\mathbf{\Gamma} \delta_{\alpha\beta} - \mathbf{\Gamma}_{\beta}) \mathbf{G}^a(\varepsilon) \right]. \quad (2.41)$$

Esta forma de escrever a corrente é muito conveniente para dispositivos com múltiplos terminais [23].

No regime linear, a diferença entre os potenciais químicos  $\delta\mu$ 's dos reservatórios é tão pequena que não causa um efeito apreciável nas funções de Green. Portanto é possível linearizar a função de Fermi na Eq. (2.41) em torno do potencial químico de equilíbrio  $\mu_{eq}$  e substituir as funções de Green  $G^{r(a)}(\varepsilon)$  pelas funções de Green de equilíbrio  $G_0^{r(a)}(\varepsilon)$ . Fazendo isto, chegamos finalmente à formula de Landauer-Büttiker para a condutância  $\mathcal{G}_{\alpha\beta}$ ,

$$I_{\alpha}^{\text{linear}} = \sum_{\beta=1}^N \mathcal{G}_{\alpha\beta} V_{\beta} \quad \text{com} \quad \mathcal{G}_{\alpha\beta} = \frac{2e^2}{h} \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon \left( -\frac{\partial f_{eq}}{\partial \varepsilon} \right) A_{\alpha\beta}^{\text{eq}}(\varepsilon), \quad (2.42)$$

onde  $V_{\beta}$  é a voltagem no contacto  $\beta$ , e  $I_{\alpha}^{\text{linear}}$  é a componente linear da corrente  $I_{\alpha}$ . O super-índice em  $A_{\alpha\beta}^{\text{eq}}(\varepsilon)$  indica que  $A_{\alpha\beta}(\varepsilon)$  é calculada usando  $G_0^{r(a)}(\varepsilon)$ . Vale a pena enfatizar que as Eqs. (2.41) e (2.42) implicam que  $\sum_{\alpha} \mathcal{G}_{\alpha\beta} = 0$  e  $\sum_{\beta} \mathcal{G}_{\alpha\beta} = 0$ . A primeira soma representa a conservação da carga, e a segunda a invariância de calibre, isto é, a invariância da corrente com respeito a uma mudança dos potenciais  $\{V_{\beta}\}$  de uma constante [23].

Atualmente, a maior parte dos experimentos com dispositivos nanoscópicos utilizam geometrias com dois contatos. Neste caso não é necessária a introdução dos coeficientes  $A_{\alpha\beta}$ , e podemos escrever a condutância linear diretamente como

$$\mathcal{G} = \left. \frac{dI}{dV} \right|_{V \rightarrow 0} = \frac{2e^2}{h} \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon \left( -\frac{\partial f}{\partial \varepsilon} \right) g(\varepsilon), \quad (2.43)$$

onde

$$g(\varepsilon) = \mathcal{T}_{12}(\varepsilon) = \text{Tr} \left[ \mathbf{\Gamma}_1 \mathbf{G}_0^r(\varepsilon) \mathbf{\Gamma}_2 \mathbf{G}_0^a(\varepsilon) \right] \quad (2.44)$$

é chamada de condutância adimensional.

### 2.4.1 Conexão com a matriz de espalhamento.

Vamos agora discutir a relação entre a condutância dada pela Eq. (2.42), e a forma padrão, fórmula de Landauer-Büttiker, que é dada em termos de matrizes de espalhamento. Isto é em princípio possível para a condutância linear, uma vez que a matriz  $S$  contém toda a informação referente a processos de espalhamento em equilíbrio e de partícula independente no condutor. Mais especificamente, os elementos da matriz de espalhamento  $S_{ab}(\varepsilon)$  são a amplitude de probabilidade para processos onde elétrons entram no condutor através do canal  $b$  e saem do sistema pelo canal  $a$  a uma energia  $\varepsilon$ . Lembremos que os índices associados aos canais denotam modos tanto de entrada (fonte) quanto de saída (dreno),  $a = (\alpha, n)$ .

Antes de prosseguir, é importante salientar que a fórmula de Landauer pode ser obtida diretamente a partir da teoria de resposta linear, sem a necessidade de recorrer ao formalismo de Funções de Green fora do equilíbrio. Isto foi feito primeiramente por Fisher e Lee [71] em 1981. Embora seja uma demonstração simples, a importância deste artigo não deve ser subestimada pois no momento de sua publicação a validade das idéias de Landauer não estava completamente estabelecida.

Por simplicidade consideraremos o caso particular de apenas dois contactos. Os canais pertencentes a um mesmo contato se agrupam naturalmente, produzindo uma estrutura de blocos na matriz de espalhamento. No caso em questão (dois contatos) temos

$$S = \begin{pmatrix} r & t' \\ t & r' \end{pmatrix} \quad (2.45)$$

Aqui,  $r$  ( $r'$ ) é constituído pelos coeficientes de reflexão para estados do contato 1 (2), enquanto que  $t$  ( $t'$ ) apresenta os coeficientes correspondentes à transmissão de elétrons que entram pelo contato 1 (2) e saem pelo contato 2 (1). Na ausência de campo magnético externo, a simetria de reversão temporal é preservada e consequentemente a matriz  $S$  é simétrica, i.e.  $t' = t^\dagger$ .

De acordo com a formula de Landauer, a condutância adimensional é expressa por

$$g = \text{Tr} \left( t t^\dagger \right). \quad (2.46)$$

A generalização da formula de Landauer para o caso de múltiplos contactos pode ser encontrada na Ref. [53].

Voltemos ao objetivo desta seção, que é, conectar as Eqs. (2.44) e (2.46). Para isto, reescrevemos o hamiltoniano dos fios da seguinte maneira

$$\mathcal{H}_L = \sum_{\alpha,n} \int_{\varepsilon_{\alpha n}}^{\infty} d\varepsilon \varepsilon c_{\varepsilon\alpha n}^\dagger c_{\varepsilon\alpha n} \quad (2.47)$$

onde  $\{c_{\varepsilon\alpha n}^\dagger, c_{\varepsilon'\alpha'n'}\} = \delta(\varepsilon - \varepsilon')\delta_{\alpha\alpha'}\delta_{nn'}$ . Em conseqüência, o hamiltoniano de contato é alterado da seguinte forma

$$\mathcal{H}_{LC} = \sum_{\alpha n, \mu} \int_{\varepsilon_{\alpha n}}^{\infty} d\varepsilon [W_{\varepsilon\alpha n, \mu} c_{\varepsilon\alpha n}^\dagger d_{\mu s} + \text{H.c.}] . \quad (2.48)$$

Note que os elementos de acoplamento  $W$ 's têm dimensões diferentes das de seus predecessores os  $V$ 's. A idéia de introduzir os operadores  $c_{\varepsilon\alpha n}^\dagger$  e  $c_{\varepsilon\alpha n}$  que relacionam estados assintóticos  $|\chi_{\varepsilon pn}\rangle$  é usual na teoria de espalhamento resonante [53]. Além disso, formular o problema de espalhamento em termos de estados assintóticos garante automaticamente a conservação do fluxo, evitando os problemas discutidos nas Refs. [72, 73].

A derivação da matriz  $S$  (ressonante) é descrita nas Ref. [53, 74]. Desprezando o tunelamento direto entre estados em diferentes fios [75], podemos escrever

$$\mathbf{S}(\varepsilon) = \mathbf{I} - i2\pi \mathbf{W} \mathbf{G}_0^r(\varepsilon) \mathbf{W}^\dagger, \quad (2.49)$$

onde  $[G_0^r]^{-1} = \varepsilon - \mathcal{H}_C + i\pi W^\dagger W$ . Por inspeção da matriz de larguras de decaimento em  $G^r$ , identificamos

$$\Gamma_{\mu\nu} = 2\pi \sum_a W_{\mu a}^* W_{\nu a} = 2\pi \sum_a V_{\mu a}^* \rho_a V_{\nu a}, \quad (2.50)$$

onde a soma varre todos os canais abertos nos contactos. Os  $V$ 's são definidos na Eq. (2.4).

Para finalizar, comparamos as Eqs. (2.45) e (2.49) para extrair a matriz de transmissão  $t$ . Usando  $(G^r)^\dagger = G^a$  e a propriedade cíclica do traço, encontramos

$$\text{Tr}(t t^\dagger) = (4\pi)^2 \text{Tr}(W_1 G_0^r W_2^\dagger W_2 G_0^a W_1^\dagger) = \text{Tr}[\Gamma_1 G_0^r \Gamma_2 G_0^a], \quad (2.51)$$

que é exatamente o resultado esperado.

# Capítulo 3

## Transporte quântico não linear

Neste capítulo descreveremos como o formalismo de funções de Green fora do equilíbrio, apresentado no capítulo anterior, descreve naturalmente o transporte quântico não linear, considerando interação Coulombiana na aproximação de campo médio. A comparação com o formalismo de matrizes de espalhamento também será discutido.

### 3.1 Abordagem em termos de matrizes de espalhamento

O ponto de partida para a descrição da condutância não linear em sistemas mesoscópicos é dado pela fórmula de Landauer-Büttiker,

$$I_\alpha = \frac{2e}{h} \sum_{\beta=1}^N \int_{-\infty}^{\infty} dE f_\beta(E) A_{\alpha\beta}(E, U(\mathbf{r})), \quad (3.1)$$

que descreve a corrente no fio  $\alpha$  na ausência de processos inelásticos. Aqui  $f_\beta(E) = f_0(E - eV_\beta)$ , com  $f_0(E) = (e^{E/k_B T} + 1)^{-1}$  a função de distribuição de Fermi e  $k_B$  a constante de Boltzmann. Para simplificar a notação escolheremos  $V_\beta$  como sendo medido em relação ao potencial de equilíbrio  $\mu_0$ , ou seja,  $V_\beta \rightarrow V_\beta - \mu_0/e$ .

A transmissão  $A_{\alpha\beta}(E, U(\mathbf{r}))$  é dada em termos da matriz de espalhamento do condutor  $\mathbf{S}_{\alpha\beta}(E, U(\mathbf{r}))$

$$A_{\alpha\beta}(E, U(\mathbf{r})) = \text{Tr}[\mathbf{1}_\alpha \delta_{\alpha\beta} - \mathbf{S}_{\alpha\beta}^\dagger \mathbf{S}_{\alpha\beta}], \quad (3.2)$$

onde as linhas e colunas de  $\mathbf{S}_{\alpha\beta}(E, U(\mathbf{r}))$  estão associadas com os modos propagantes

nos contatos  $\alpha$  e  $\beta$ , respectivamente.  $\mathbf{1}_\alpha$  é a matriz identidade com dimensão dada pelo número de canais de propagação no contato  $\alpha$ . O traço é tomado sobre os canais abertos em  $\alpha$  e  $\beta$ .

A matriz de espalhamento  $\mathbf{S}_{\alpha\beta}$  e conseqüentemente o coeficiente de transmissão  $A_{\alpha\beta}$  são funções da energia do elétron e funcionais do potencial eletrostático  $U(\mathbf{r})$  presente no condutor. Em resposta linear,  $A_{\alpha\beta}$  é calculado com o potencial de equilíbrio  $U_{\text{eq}}(\mathbf{r})$  que se estabelece quando todos os reservatórios se encontram no mesmo potencial químico  $\mu_0$ . Para ir além desse regime é necessário calcular  $U(\mathbf{r})$  de forma autoconsistente, como primeiramente observado por Landauer [76].

Para iniciar, é conveniente expandir todas as quantidades em potências de  $V$ . O potencial eletrostático  $U(\mathbf{r})$  é dado por

$$U(\mathbf{r}) = U_{\text{eq}}(\mathbf{r}) + \sum_{\alpha} u_{\alpha}(\mathbf{r})V_{\alpha} + \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta} u_{\alpha\beta}(\mathbf{r})V_{\alpha}V_{\beta} + O(V^3), \quad (3.3)$$

onde  $u_{\alpha\beta\dots}(\mathbf{r})$  é o potencial característico definido por

$$u_{\alpha\beta\dots}(\mathbf{r}) = \left( \frac{\partial}{\partial V_{\alpha}} \frac{\partial}{\partial V_{\beta}} \dots \right) U(\mathbf{r}) \Big|_{\{V_{\gamma}\}=0}. \quad (3.4)$$

Aqui  $\{V_{\gamma}\} = 0$  serve para denotar que  $V_{\gamma} = 0$ , para todos os contatos.

Algumas propriedades do potencial característico podem ser obtidas a partir de considerações físicas simples.

- Mudanças no potencial químico do reservatório  $\alpha$  não afetam  $U(\mathbf{r})$  no interior do reservatório  $\beta$ . Assim,  $u_{\alpha}(\mathbf{r}) = 0$ , sempre que  $\mathbf{r}$  se encontre dentro do reservatório  $\beta \neq \alpha$ .
- Para  $\mathbf{r}$  no interior de  $\alpha$ ,  $U(\mathbf{r}) = V_{\alpha}$ . Portanto  $u_{\alpha}(\mathbf{r}) = 1$ , se  $\mathbf{r} \in \alpha$ .
- Uma mudança global dos potenciais aplicados,  $V_{\alpha} \rightarrow V_{\alpha} + V_0$ , faz com que  $U(\mathbf{r}) \rightarrow U(\mathbf{r}) + V_0$ . Isto implica a regra de soma  $\sum_{\alpha} u_{\alpha}(\mathbf{r}) = 1$  que é válida para qualquer ponto do espaço  $\mathbf{r}$ .

A expansão correspondente à corrente  $I_{\alpha}$  é

$$I_{\alpha} = \sum_{\beta} \mathcal{G}_{\alpha\beta} V_{\beta} + \sum_{\beta\gamma} \mathcal{G}_{\alpha\beta\gamma} V_{\beta} V_{\gamma} + \sum_{\beta\gamma\delta} \mathcal{G}_{\alpha\beta\gamma\delta} V_{\beta} V_{\gamma} V_{\delta} + \dots \quad (3.5)$$

Em concordância com a notação padrão [23], não escrevemos  $I_{\alpha}$  como uma série de Taylor nos  $\{V_{\alpha}\}$ .

O coeficiente  $\mathcal{G}_{\alpha\beta}$  corresponde à condutância linear, e é dado por

$$\mathcal{G}_{\alpha\beta} = \frac{2e^2}{h} \int_{-\infty}^{\infty} dE \left( -\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) A_{\alpha\beta}(E, U_{\text{eq}}(\mathbf{r})), \quad (3.6)$$

onde os coeficientes de transmissão  $A_{\alpha\beta}(E, U_{\text{eq}}(\mathbf{r}))$  [23], são calculados através da matriz de espalhamento  $S$  obtida para o potencial de equilíbrio  $U_{\text{eq}}(\mathbf{r})$ .

A primeira correção não linear à corrente, representada por  $\mathcal{G}_{\alpha\beta\gamma}$ , é dada por [23, 16]

$$\mathcal{G}_{\alpha\beta\gamma} = \frac{2e^3}{h} \int_{-\infty}^{\infty} dE \left( -\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) \int d\mathbf{r} \left[ u_\gamma(\mathbf{r}) - \frac{1}{2} \delta_{\beta\gamma} \right] \frac{\delta A_{\alpha\beta}}{e\delta U(\mathbf{r})} \Big|_{\{V_\alpha\}=0}, \quad (3.7)$$

onde a integração espacial é feita na região onde  $\delta A_{\alpha\beta}/\delta U(\mathbf{r})|_{\{V_\alpha\}=0}$  é não nulo, isto é, no interior do condutor.

A expressão anterior depende explicitamente do potencial eletrostático via  $u_\alpha(\mathbf{r})$ . Para determinar esse último, o formalismo tem que ser complementado com um cálculo autoconsistente da distribuição eletrônica, ou com algum tipo de aproximação. Na Ref. [23] é feita uma aproximação de campo médio usando a seguinte linha de argumentação: O potencial  $U(\mathbf{r})$  é modificado pelo desbalanço de carga  $\delta n(\mathbf{r})$  induzido pelo câmbio dos potenciais químicos nos reservatórios. Por outro lado,  $\delta n(\mathbf{r})$  é o resultado da carga injetada pelos fios e da carga induzida no condutor em resposta à carga injetada.

As propriedades de injeção do condutor são descritas pela injetividade

$$\frac{dn^s(\mathbf{r}, \alpha)}{dE} = -\frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} dE \left( -\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) \sum_{\beta} \text{Tr} \left[ \mathbf{S}_{\beta\alpha}^\dagger \frac{\delta \mathbf{S}_{\beta\alpha}}{e\delta U(\mathbf{r})} - \frac{\delta \mathbf{S}_{\beta\alpha}^\dagger}{e\delta U(\mathbf{r})} \mathbf{S}_{\beta\alpha} \right], \quad (3.8)$$

calculada com  $\{V_\gamma\} = 0$ . O super-índice  $S$  é empregado para distinguir as quantidades que são calculadas dentro do formalismo de matrizes de espalhamento. Como  $dn^s/dE$  inclui a degenerescência de spin, a nossa definição difere da apresentada na Ref. [23] de um fator de 2.

A densidade de carga induzida, em primeira ordem em  $V$ , é dada por

$$dn_{\text{ind}}(\mathbf{r}) = e \sum_{\alpha} \int d\mathbf{r}' \Pi(\mathbf{r}, \mathbf{r}') u_\alpha(\mathbf{r}') dV_\alpha \quad (3.9)$$

onde  $\Pi(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$  é a função de polarização de Lindhard. O formalismo de matrizes de espalhamento não oferece uma descrição desta função. Porém, lembrando a relação entre o tempo de atraso de Wigner-Smith e a densidade de estados do condutor,  $dn_{\text{ind}}(\mathbf{r})$  pode ser escrito na aproximação de Thomas-Fermi como

$$dn_{\text{ind}}(\mathbf{r}) = e \sum_{\alpha} \frac{dn^s(\mathbf{r})}{dE} u_\alpha(\mathbf{r}) dV_\alpha. \quad (3.10)$$

A densidade local de estados  $dn^s/dE$  é

$$\frac{dn^s(\mathbf{r})}{dE} = \sum_{\beta} \frac{dn^s(\beta, \mathbf{r})}{dE}, \quad (3.11)$$

onde  $dn^s(\beta, \mathbf{r})/dE$  é chamada de emissividade e é dada por

$$\frac{dn^s(\beta, \mathbf{r})}{dE} = -\frac{1}{2\pi i} \int dE \left( -\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) \sum_{\alpha} \text{Tr} \left[ \mathbf{S}_{\beta\alpha}^{\dagger} \frac{\delta \mathbf{S}_{\beta\alpha}}{e\delta U(\mathbf{r})} - \frac{\delta \mathbf{S}_{\beta\alpha}^{\dagger}}{e\delta U(\mathbf{r})} \mathbf{S}_{\beta\alpha} \right]. \quad (3.12)$$

Com tais elementos em mãos, escrevemos a equação de Poisson

$$-\nabla^2 u_{\alpha}(\mathbf{r}) + 4\pi e^2 \frac{dn^s(\mathbf{r})}{dE} u_{\alpha}(\mathbf{r}) = 4\pi e^2 \frac{dn^s(\mathbf{r}, \alpha)}{dE}, \quad (3.13)$$

onde tanto a densidade de estados quanto a injetividade dependem unicamente da matriz de espalhamento.

Os coeficientes correspondentes a ordens superiores da expansão da condutância,  $\mathcal{G}_{\alpha\beta\gamma\dots}$ , podem ser calculados sem maiores dificuldades uma vez conhecidos os  $u_{\alpha\beta\gamma\dots}$ . Por outro lado, obter equações auto-consistentes para os potenciais característicos  $u_{\alpha\beta\gamma\dots}$  é bem mais complexo. Isto foi feito apenas até a segunda ordem, usando a aproximação de Thomas-Fermi, como descrito na Ref. [77].

## 3.2 Abordagem em termos de funções de Green.

Nesta seção apresentaremos um formalismo sistemático para calcular os coeficientes da condutância  $\mathcal{G}_{\alpha\beta\gamma\dots}$  e o potencial auto-consistente  $U(\mathbf{r})$ . Para tal fim, expandiremos tanto  $f_{\alpha}(E)$  quanto  $T_{\alpha\beta}(E, U(\mathbf{r}))$  presentes na equação:

$$I_{\alpha} = -\frac{2e}{h} \sum_{\beta=1}^N \int_{-\infty}^{\infty} dE f_{\beta}(E) T_{\alpha\beta}(E, \{V_{\gamma}\}). \quad (3.14)$$

Para começar, escrevemos a função de Green retardada (avançada):

$$G^{r(a)}(E) = \frac{1}{E - H_0 - eU - \Sigma^{r(a)}(E)} \quad (3.15)$$

sem escolhermos nenhuma representação particular. Em seguida, expandimos  $G^{r(a)}$  considerando que o incremento dos potenciais químicos nos reservatórios afeta ambos  $U$  e  $\Sigma$ . O resultado é a equação de Dyson

$$G^{r(a)} = G_0^{r(a)} + G_0^{r(a)} V_{\text{eff}} G^{r(a)}, \quad (3.16)$$

onde a perturbação efetiva do potencial  $V_{\text{eff}}$  é dada por

$$V_{\text{eff}}(E) = eU - eU_{\text{eq}} + \sum_{\alpha} \sum_{n \in \alpha} \left[ \Sigma_n^{r(a)}(E - eV_{\alpha}) - \Sigma_n^{r(a)}(E) \right], \quad (3.17)$$

e a função de Green de equilíbrio é dada por

$$G_0^{r(a)}(E) = \frac{1}{E - H_0 - eU_{\text{eq}} - \Sigma_{\text{eq}}^{r(a)}(E)}. \quad (3.18)$$

O próximo passo consiste em escrever a auto energia

$$\Sigma^{r(a)}(E) = \sum_{\alpha} \sum_{n \in \alpha} \Sigma_n^{r(a)}(E - eV_{\alpha}) \quad (3.19)$$

como

$$\Sigma_n^{r(a)}(E - eV_{\alpha}) = \Sigma_n^{r(a)}(E) - eV_{\alpha} \left. \frac{\partial \Sigma_n^{r(a)}}{\partial E} \right|_{V_{\alpha}=0} + e^2 V_{\alpha}^2 \left. \frac{\partial^2 \Sigma_n^{r(a)}}{\partial E^2} \right|_{V_{\alpha}=0} + \dots \quad (3.20)$$

onde  $\Sigma^{r(a)}(E) = \Sigma_{\text{eq}}^{r(a)}(E)$ . Da Eq. (3.20) vemos que, na aproximação de banda larga, as auto energias (tanto retardada quanto avançada) não dependem em  $\{V_{\alpha}\}$ , já que

$$\left. \frac{\partial \Sigma_n^{r(a)}}{\partial E} \right|_{V_{\alpha}=0} \approx \mp \frac{i}{2} \left. \frac{\partial \Gamma_n}{\partial E} \right|_{V_{\alpha}=0} = 0. \quad (3.21)$$

Com isto, observa-se que  $V_{\text{eff}}$  depende unicamente dos potenciais característicos

$$V_{\text{eff}} = e \sum_{\alpha} u_{\alpha} V_{\alpha} + \frac{1}{2} e \sum_{\alpha\beta} u_{\alpha\beta} V_{\alpha} V_{\beta} + \dots \quad (3.22)$$

Inserindo a Eq. (3.22) na (3.16) obtemos uma expressão formal para  $G^{r(a)}$  para qualquer ordem em  $V$ .

Com o objetivo de calcular os potenciais característicos ( $u_{\alpha\beta\dots}$ ) vamos escrever o desbalanço na densidade eletrônica  $\delta n(\mathbf{r}) = n(\mathbf{r}) - n_{\text{eq}}(\mathbf{r})$  originado pela mudança dos potenciais químicos nos reservatórios.

Em termos de funções de Green, a densidade eletrônica é dada por

$$n(\mathbf{r}, t) = \sum_s \langle \psi_s^{\dagger}(\mathbf{r}, t) \psi_s(\mathbf{r}, t) \rangle = -2i\hbar \langle \mathbf{r} | G^{<}(t, t) | \mathbf{r} \rangle = -2i \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dE}{2\pi} \langle \mathbf{r} | G^{<}(E) | \mathbf{r} \rangle \quad (3.23)$$

onde os operadores de campo  $\psi_s(\mathbf{r}, t)$  estão definidos por

$$\psi_s(\mathbf{r}, t) = \sum_{\mu} d_{\mu s} \phi_{\mu}(\mathbf{r}). \quad (3.24)$$

Para calcular  $\delta n(\mathbf{r})$ , expandimos  $G^< = G^r \Sigma^< G^a$  em potencias de  $\{V_\alpha\}$ . Utilizando a aproximação de banda larga na expansão de  $\Sigma^<$  temos

$$\begin{aligned} \Sigma^<(E) &= \sum_{\alpha} \sum_{n \in \alpha} \Sigma_n^<(E - eV_\alpha) \approx i \sum_{\alpha} \sum_{n \in \alpha} f_0(E - eV_\alpha) \Gamma_n \\ &= i \sum_{\alpha} f_0(E - eV_\alpha) \Gamma_{\alpha} \\ &= i \left( f_0 \Gamma - e \frac{\partial f_0}{\partial E} \sum_{\alpha} V_{\alpha} \Gamma_{\alpha} + \dots \right). \end{aligned} \quad (3.25)$$

Finalmente  $G^<$ , até ordem linear em  $V$ , lê-se

$$G^< = i f_0 G_0^r \Gamma G_0^a - e \sum_{\alpha} V_{\alpha} \left[ i \frac{\partial f_0}{\partial E} G_0^r \Gamma_{\alpha} G_0^a + f_0 (G_0^r u_{\alpha} G_0^r - G_0^a u_{\alpha} G_0^a) \right] + O(V^2). \quad (3.26)$$

Perto do equilíbrio, quando  $\{V_{\alpha}\} \rightarrow 0$ , a função de Green  $G^< \rightarrow G_0^< = -2i f_0 \text{Im} G_0^r$ , em concordância com o teorema de flutuação-dissipação [78]. Usando as Eqs. (3.23) e (3.26), escrevemos a densidade eletrônica como

$$n(\mathbf{r}) = \sum_{\ell} n^{(\ell)}(\mathbf{r}) \quad (3.27)$$

onde o super-índice  $\ell$  corresponde à potencia  $V^{\ell}$ . Note que  $n^{(0)}(\mathbf{r}) = n_{\text{eq}}(\mathbf{r})$ .

Agora estamos prontos para identificar, ordem a ordem, os coeficientes da condutância  $\mathcal{G}_{\alpha\beta\gamma\dots}$ . Introduzindo Eqs. (3.16) e (3.22) na Eq.(3.14), obtemos a transmissão  $T_{\alpha\beta}$  em termos das funções de Green de equilíbrio e dos potenciais característicos. Estes últimos podem ser calculados a partir da equação de Hartree

$$\nabla^2 U(\mathbf{r}) = -4\pi e n(\mathbf{r}) = 8\pi i e \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dE}{2\pi} \langle \mathbf{r} | G^<(E) | \mathbf{r} \rangle, \quad (3.28)$$

com a expansão da função de Green  $G^<$  da Eq. (3.26).

### 3.2.1 Coeficiente linear da condutância.

Em primeira ordem em  $V$ , a corrente no contato  $\alpha$  é

$$I_{\alpha}^{(1)} = \sum_{\beta} \mathcal{G}_{\alpha\beta} V_{\beta}. \quad (3.29)$$

O coeficiente linear da condutância  $\mathcal{G}_{\alpha\beta}$  é identificado a partir da expansão da Eq. (3.14) em termos do potencial aplicado  $V_{\beta}$ , e é dado por

$$\mathcal{G}_{\alpha\beta} = -\frac{2e^2}{h} \int_{-\infty}^{\infty} dE \left( -\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) T_{\alpha\beta}(E, \{V_{\gamma}\} = 0).$$

onde

$$T_{\alpha\beta}(E, \{V_\gamma\} = 0) = \text{Tr} \left[ \mathbf{\Gamma}_\alpha \mathbf{G}_0^r(E) (\mathbf{\Gamma} \delta_{\alpha\beta} - \mathbf{\Gamma}_\beta) \mathbf{G}_0^a(E) \right]. \quad (3.30)$$

A Eq. (3.30) é idêntica à formula de Landauer-Büttiker [79], como discutido no capítulo anterior.

As equações (3.23) e (3.26) fornecem a densidade eletrônica de estados de equilíbrio

$$n_{\text{eq}}(\mathbf{r}) = -\frac{2}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dE f_0(E) \text{Im} \langle \mathbf{r} | G_0^r(E) | \mathbf{r} \rangle. \quad (3.31)$$

É importante destacar ainda que mesmo na aproximação de Hartree (local), dependendo do sistema, o cálculo de  $U_{\text{eq}}(\mathbf{r})$  pode representar um trabalho computacional árduo. Em sistemas mesoscópicos, devido à natureza caótica e/ou desordenada do sistema em consideração, resultados quantitativos podem ser obtidos por meio de tratamentos estatísticos [80] usando teoria de matrizes aleatórias ou técnicas diagramáticas. Em contraste, em eletrônica molecular um cálculo completo da estrutura eletrônica é necessário.

Uma simetria importante da condutância no regime linear é obtida ao considerarmos a presença de um campo magnético externo. O coeficiente de condutância linear satisfaz as relações de reciprocidade de Onsager-Casimir sob inversão do campo magnético [81]. Usando a micro-reversibilidade

$$G_0^{r(a)}(-B) = [G_0^{r(a)}(B)]^T \quad (3.32)$$

e a propriedade cíclica do traço em (3.30), é possível mostrar que

$$\mathcal{G}_{\alpha\beta}(-B) = \mathcal{G}_{\beta\alpha}(B) \quad (3.33)$$

para  $\alpha \neq \beta$ . No que se refere aos coeficientes diagonais, onde  $\alpha = \beta$ , e possível usar a condição de conservação da corrente e a Eq. (3.33), ou diretamente a relação

$$\mathbf{G}^a - \mathbf{G}^r = i\mathbf{G}^a \mathbf{\Gamma} \mathbf{G}^r = -i\mathbf{G}^r \mathbf{\Gamma} \mathbf{G}^a, \quad (3.34)$$

para mostrar que  $\mathcal{G}_{\alpha\alpha}(B) = \mathcal{G}_{\alpha\alpha}(-B)$ .

No caso particular de dois terminais, existe apenas um coeficiente independente, que é par no campo magnético,

$$\mathcal{G}_{12}(-B) = \mathcal{G}_{12}(B), \quad (3.35)$$

o que mostra que as relações de Onsager são particularmente restritivas neste caso. No formalismo de matrizes de espalhamento, a Eq. (3.35) é obtida usando a unitariedade da matriz  $S$  [79, 82], enquanto que no formalismo de funções de Green ela é obtida

combinando a conservação da corrente com  $\mathcal{G}_{\alpha\alpha}(B) = \mathcal{G}_{\alpha\alpha}(-B)$ . A paridade de  $\mathcal{G}$  com respeito a  $B$  foi observada experimentalmente [83, 84], e tem implicações importantes para experimentos de interferência quântica. Em anéis mesoscópicos conectados a dois terminais é impossível medir diferenças de fases, já que as oscilações de Aharonov-Bohm têm a fase restrita aos valores 0 ou  $\pi$  [84, 85]. Este fenômeno é conhecido como rigidez de fase.

### 3.2.2 Coeficiente de segunda ordem da condutância.

O termo de seguinte ordem na expansão da corrente é

$$I_{\alpha}^{(2)} = \sum_{\beta\gamma} \mathcal{G}_{\alpha\beta\gamma} V_{\beta} V_{\gamma}. \quad (3.36)$$

O coeficiente  $\mathcal{G}_{\alpha\beta\gamma}$ , obtido da expansão de  $\sum_{\beta} f_{\beta} T_{\alpha\beta}$  na Eq. (3.14), é formalmente dado pela Eq. (3.7):

$$\mathcal{G}_{\alpha\beta\gamma} = -\frac{2e^3}{h} \int_{-\infty}^{\infty} dE \left( -\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) \int_{\mathcal{V}} d\mathbf{r} \left[ u_{\gamma}(\mathbf{r}) - \frac{\delta_{\beta\gamma}}{2} \right] \frac{\delta T_{\alpha\beta}}{e\delta U(\mathbf{r})} \Big|_{\{V_{\delta}=0\}}. \quad (3.37)$$

A expressão explícita em termos de funções de Green é [20]

$$\begin{aligned} \mathcal{G}_{\alpha\beta\gamma} = -\frac{2e^3}{h} \int_{-\infty}^{\infty} dE \left( -\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) \text{Tr} \left\{ \Gamma_{\alpha} G_0^r \left[ \left( u_{\gamma} - \frac{\delta_{\beta\gamma}}{2} \right) G_0^r (\Gamma \delta_{\alpha\beta} - \Gamma_{\beta}) \right. \right. \\ \left. \left. + (\Gamma \delta_{\alpha\beta} - \Gamma_{\beta}) G_0^a \left( u_{\gamma} - \frac{\delta_{\beta\gamma}}{2} \right) \right] G_0^a \right\}. \quad (3.38) \end{aligned}$$

Vale a pena notar que a Ref. [20] apresenta esta expressão sem considerar a aproximação de banda larga, considerando a dependência em energia da auto energia. Aqui preferimos empregar a aproximação de banda larga a fim de simplificar as expressões e tornar mais claro o formalismo. A remoção de tal aproximação não gera novas dificuldades.

Uma vez que a conservação da corrente é herdada da Eq. (3.14), a regra de soma  $\sum_{\alpha} \mathcal{G}_{\alpha\beta\gamma} = 0$  é satisfeita trivialmente por todos os termos da expansão. A invariância da corrente sob uma diferença global nas voltagens aplicadas nos terminais nos proporciona a seguinte regra de soma,  $\sum_{\gamma} (\mathcal{G}_{\alpha\beta\gamma} + \mathcal{G}_{\alpha\gamma\beta}) = 0$  [23]. Os coeficientes  $\mathcal{G}_{\alpha\beta\gamma}$  da Eq. (3.38) satisfazem esta regra de soma sempre que os potenciais característicos satisfaçam  $\sum_{\gamma} u_{\gamma}(\mathbf{r}) = 1$ . Esta última condição é precisamente a condição de invariância de calibre dos potenciais característicos, e será discutida posteriormente.

Agora voltamos nossa atenção para a densidade eletrônica  $n^{(1)}(\mathbf{r})$  de (3.27). A expansão de  $G^<$  em potências de  $V$  junto com a Eq. (3.23) resulta em

$$n^{(1)}(\mathbf{r}) = e \sum_{\alpha} V_{\alpha} \left[ \int_{\mathcal{V}} d\mathbf{r}' \Pi(\mathbf{r}, \mathbf{r}') u_{\alpha}(\mathbf{r}') - \frac{dn(\mathbf{r}, \alpha)}{dE} \right], \quad (3.39)$$

onde

$$\Pi(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = -2i \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dE}{2\pi} f_0 \left[ \langle \mathbf{r} | G_0^r(E) | \mathbf{r}' \rangle \langle \mathbf{r}' | G_0^r(E) | \mathbf{r} \rangle - \text{H.c.} \right] \quad (3.40)$$

é a função de Lindhard e

$$\frac{dn(\mathbf{r}, \alpha)}{dE} = 2 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dE}{2\pi} \left( -\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) \langle \mathbf{r} | G_0^r \Gamma_{\alpha} G_0^a | \mathbf{r} \rangle \quad (3.41)$$

é a densidade (parcial) local de estados, chamada de injetividade no formalismo de matrizes de espalhamento. A forma compacta da Eq. (3.41) é devida à aproximação de banda larga. Como foi discutido na Ref. [20],  $dn(\mathbf{r}, \alpha)/dE$  pode ser facilmente modificado para levar em consideração a dependência específica na energia de  $\Sigma$ . Tais correções são importantes em eletrônica molecular, onde as características dos contactos são relevantes.

Na aproximação de Hartree, os potenciais característicos  $u_{\gamma}(\mathbf{r})$  são determinados por

$$\nabla^2 u_{\alpha}(\mathbf{r}) = 4\pi e^2 \left[ \int_{\mathcal{V}} d\mathbf{r}' \Pi(\mathbf{r}, \mathbf{r}') u_{\alpha}(\mathbf{r}') - \frac{dn(\mathbf{r}, \alpha)}{dE} \right] \quad (3.42)$$

com as condições de contorno discutidas na Sec. 3.1. Esta equação tem a mesma estrutura que a Eq. (3.13). (A comparação destas equações será tratada na próxima seção.) Os dois termos do lado direito da Eq. (3.42) provêm do balanço de cargas  $n^{(1)}(\mathbf{r})$  [86].

Empregando a Eq. (3.34) e integrando por partes obtém-se a relação

$$\sum_{\alpha} \frac{dn(\mathbf{r}, \alpha)}{dE} = \int_{\mathcal{V}} d\mathbf{r}' \Pi(\mathbf{r}, \mathbf{r}') . \quad (3.43)$$

Esta relação é também válida além da aproximação de banda larga.[20]

Somando a Eq. (3.42) para todos os contactos  $\alpha$ , obtemos

$$\nabla^2 \sum_{\alpha} u_{\alpha}(\mathbf{r}) = 4\pi e^2 \int_{\mathcal{V}} d\mathbf{r}' \Pi(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \left[ \sum_{\alpha} u_{\alpha}(\mathbf{r}') - 1 \right]. \quad (3.44)$$

Esta equação, em conjunto com as condições de contorno para  $u_{\alpha}$ , produz a regra de soma  $\sum_{\alpha} u_{\alpha} = 1$ . Desta forma recuperamos a regra de soma para os potenciais característicos sinalizada em [23]. Esta é uma prova simples de que, na aproximação de Hartree, o

formalismo de funções de Green é manifestamente invariante de calibre. Em contraste, o formalismo de matrizes de espalhamento necessita impor a regra de soma  $\sum_{\alpha} u_{\alpha} = 1$  para se obter (3.13).

Outro caminho para obter a regra de soma  $\sum_{\alpha} u_{\alpha} = 1$  consiste em observar que ela automaticamente garante que  $n^{(1)}(\mathbf{r})$  permaneça constante sob um deslocamento global dos potenciais  $V_{\alpha} \rightarrow V_{\alpha} + V_0$  (como foi mostrado para todas as ordens na seção anterior). Como conseqüência, é evidente que a implementação padrão da DFT também é invariante de calibre, sem importar o funcional de troca e correlação  $U_{xc}[n(\mathbf{r})]$  empregado.

Experimentalmente, observa-se que as relações de reciprocidade de Onsager-Casimir não são válidas para a condutância quântica não-linear [9, 14, 10, 11]. Teoricamente, a violação de tais relações é explicada em termos de interação Coulombiana [17, 21]. No formalismo de funções de Green este resultado se obtém a partir da Eq. (3.37) e fazendo uso da condição de micro-reversibilidade para as funções de Green  $G^{r(a)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E, B) = G^{r(a)}(\mathbf{r}', \mathbf{r}; E, -B)$ . Embora  $\delta T_{\alpha\beta}/\delta U(\mathbf{r})$ , calculado para  $\{V_{\gamma}\} = 0$ , seja função par no campo magnético, em geral  $u_{\gamma}(\mathbf{r}, B) \neq u_{\gamma}(\mathbf{r}, -B)$ . Isto pode ser observado da Eq. (3.42), ainda que a função de Lindhard seja uma função par em  $B$ ,

$$\Pi(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; B) = \Pi(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; -B), \quad (3.45)$$

a injetividade não é, ou seja

$$\frac{dn(\mathbf{r}, \alpha, B)}{dE} \neq \frac{dn(\mathbf{r}, \alpha, -B)}{dE}. \quad (3.46)$$

Desta forma reencontramos o resultado da Ref. [17].

### 3.2.3 Ordens superiores.

A expressão geral para  $G_{\alpha\beta_1 \dots \beta_J}$  em termos das derivadas funcionais da transmissão  $T_{\alpha\beta}$  é

$$\begin{aligned} \mathcal{G}_{\alpha\beta_1 \dots \beta_J} &= -\frac{2e^2}{h} \int_{-\infty}^{\infty} dE \left( -\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) \sum_{l=1}^J \sum_{n=0}^{J-l} \frac{(-1)^{l+1}}{l!} \delta_{\beta_1\beta_2} \delta_{\beta_2\beta_3} \dots \delta_{\beta_{l-1}\beta_l} \\ &\times \int d\mathbf{r}_1 \dots d\mathbf{r}_{l-1} \int d\mathbf{r}'_1 \dots d\mathbf{r}'_n \frac{\delta T_{\alpha\beta_1}}{\delta U(\mathbf{r}_1) \dots \delta U(\mathbf{r}_{l-1}) \delta U(\mathbf{r}'_1) \dots \delta U(\mathbf{r}'_n)} \\ &\times K_{\beta_{l+1} \dots \beta_J}^{(n)}(\mathbf{r}'_1, \dots, \mathbf{r}'_n), \end{aligned} \quad (3.47)$$

onde  $K^{(n)}$  é definido como

$$K_{\beta_{l+1} \dots \beta_J}^{(n)}(\mathbf{r}'_1, \dots, \mathbf{r}'_n) = \frac{1}{(J-l)! n!} \frac{\partial}{\partial V_{\beta_{l+1}}} \dots \frac{\partial}{\partial V_{\beta_J}} \left[ U(\mathbf{r}'_1) \dots U(\mathbf{r}'_n) \right] \Bigg|_{\{V_{\gamma}\}=0} \quad (3.48)$$

e está relacionada com o potencial característico através da Eq. (3.4). Para  $n = 0$ , definimos  $K^{(0)} = \delta_{JI}$ .

Para obter a Eq. (3.47) identificamos os termos contendo  $V^J$  na expansão da corrente com os coeficientes  $\mathcal{G}_{\alpha,\beta_1,\dots,\beta_J}$  da Eq. (3.5). A potencia  $V^J$  provêm do produto das expansões de  $T_{\alpha\beta}$  e  $f_0$  na Eq. (3.14). O índice da primeira soma na Eq. (3.47) corresponde ao número de  $V$ 's que procedem da expansão de  $f_0$ . As potências restantes de  $V$ 's ( $J - l$ ), provêm da expansão da transmissão  $T_{\alpha\beta}$ , isto é, do termo que contém uma derivada de ordem  $J - l$  da transmissão  $T_{\alpha\beta}$  com relação aos potenciais  $V_\alpha$ . Por sua vez, as  $J - l$  derivadas de  $T_{\alpha\beta}$  com respeito dos  $V$ 's dão origem a potenciais característicos e derivadas funcionais do tipo  $\delta T_{\alpha\beta}/\delta U(\mathbf{r}')$ . O índice  $n$  da segunda somatoria, representa o número de derivadas  $\partial_{V_\gamma}$  que produzem termos do tipo  $u_\gamma(\mathbf{r}')\delta/\delta U(\mathbf{r}')$ . As restantes  $J - l - n$  derivadas são responsáveis por incrementar a ordem dos potenciais característicos  $u_{\beta_1\beta_2\dots}$ . A expansão de  $f_0$  é trivial. Porém, para fatorar o termo  $(-\partial_E f_0)$  temos que integrar por partes. Como resultado, obtemos  $l - 1$  derivadas funcionais adicionais que atuam em  $T_{\alpha\beta}$ . Finalmente, note que, os índices  $\beta_1 \cdots \beta_l$  devem ser simetrizados.

É interessante destacar que expressões com estruturas similares foram obtidas usando mecânica estatística clássica fora do equilíbrio [87]. A conexão entre estes resultados é ainda um tópico aberto.

A expressão para o potencial característico de ordem  $J$  é obtida a partir da expansão de  $G^<$  na Eq. (3.28)

$$\begin{aligned} \nabla^2 u_{\beta_1 \dots \beta_J}(\mathbf{r}) = & -8\pi e \int \frac{dE}{2\pi} \frac{\partial}{\partial V_{\beta_1}} \cdots \frac{\partial}{\partial V_{\beta_J}} \sum_{k=0}^J \langle \mathbf{r} | G_0^r \overbrace{V_{\text{eff}}^r G_0^r \cdots V_{\text{eff}}^r G_0^r}^{k \text{ termos}} \sum_{\alpha} f(E - eV_\alpha) \Gamma_\alpha \\ & \times \sum_{j=0}^{J-k} \overbrace{G_0^a V_{\text{eff}}^a G_0^a \cdots V_{\text{eff}}^a G_0^a}^{j \text{ termos}} | \mathbf{r} \rangle \Big|_{\{V_\gamma\}=0}. \end{aligned} \quad (3.49)$$

O potencial efetivo  $V_{\text{eff}} = eU - eU_{\text{eq}}$  não é afetado por um deslocamento global dos potenciais aplicados  $V_\alpha \rightarrow V_\alpha + V_0$ , o que garante a invariância de calibre de nosso resultado. As equações (3.47) e (3.49) permitem-nos solucionar o problema não-linear para qualquer ordem. Como teste de consistência, verificamos que as expressões obtidas para ordens mais baixas são recuperadas a partir destas equações.

A fim de ilustrar a utilidade de nossas equações, vamos empregá-las para obter a

condutância em terceira ordem:

$$\mathcal{G}_{\alpha\beta\gamma\delta} = -\frac{e^2}{h} \int_{-\infty}^{\infty} dE \left( -\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) \left\{ \int d\mathbf{r}_1 \frac{\delta T_{\alpha\beta}}{\delta U(\mathbf{r}_1)} u_{\delta\gamma}(\mathbf{r}_1) \right. \quad (3.50)$$

$$\left. + \int d\mathbf{r}_1 \int d\mathbf{r}_2 \frac{\delta T_{\alpha\beta}}{\delta U(\mathbf{r}_1)\delta U(\mathbf{r}_2)} \left[ u_\gamma(\mathbf{r}_1)u_\delta(\mathbf{r}_2) - \delta_{\beta\gamma}u_\delta(\mathbf{r}_1) + \frac{1}{3}\delta_{\beta\gamma}\delta_{\gamma\delta} \right] \right\},$$

e a equação correspondente para o potencial  $u_{\alpha\beta}$ :

$$\nabla^2 u_{\alpha\beta}(\mathbf{r}) = -4\pi e^2 \left[ -\frac{dn(\mathbf{r})}{dE} u_{\alpha\beta}(\mathbf{r}) + e \frac{d^2 n(\mathbf{r})}{dE^2} u_\alpha(\mathbf{r}) u_\beta(\mathbf{r}) + e \frac{d^2 n(\mathbf{r}, \beta)}{dE^2} \delta_{\alpha\beta} \right. \quad (3.51)$$

$$\left. - e \frac{d^2 n(\mathbf{r}, \beta)}{dE^2} u_\alpha(\mathbf{r}) - e \frac{d^2 n(\mathbf{r}, \alpha)}{dE^2} u_\beta(\mathbf{r}) \right].$$

Por simplicidade escrevemos  $u_{\alpha\beta}$  na aproximação de Thomas-Fermi. É fácil ver que  $\sum_\alpha u_{\alpha\beta} = 0$ , respeitando invariância de calibre. A Eq.(3.51) coincide com a apresentada na Ref. [20].

### 3.3 Conexão entre os dois formalismos.

No que segue, descreveremos a equivalência entre os resultados obtidos no formalismo baseado em funções de Green (descritos na seção anterior) e os referentes ao formalismo de matrizes de espalhamento (formulados por Büttiker e colaboradores, e resumidos na seção 3.1).

Lembramos que as idéias básicas empregadas na construção do formalismo de matrizes de espalhamento são:

- Perceber que a matriz de espalhamento é uma função da energia e um funcional do potencial eletrostático no condutor, sendo que este último, em situação de não-equilíbrio, é função dos potenciais nos contatos. Desta forma, a matriz  $S(E, U(\mathbf{r}))$ , usada para construir coeficiente de transmissão  $T_{\alpha\beta}$ , pode ser expandida nos potenciais nos contactos, dando origem às expressões para os coeficientes da condutância.
- Argumentos físicos são empregados para construir a equação de Poisson que relaciona  $U(\mathbf{r})$  com termos de fonte expressos como função da própria matriz de espalhamento  $S$ . A invariância de calibre é uma imposição que serve de guia na construção da equação dos potenciais característicos.

Para começar, escrevemos a matriz de espalhamento (equilíbrio) na forma padrão [88]

$$S_{mn}(E) = \delta_{mn} - 2\pi i \sum_{\mu\nu} (\rho_n \rho_m)^{1/2} V_{\mu m}^* [G_0^r(E)]_{\mu\nu} V_{\nu n}, \quad (3.52)$$

onde  $n$  e  $m$  representam os modos propagantes nos fios, e as funções de Green são calculadas com o potencial eletrostático de equilíbrio  $U_{\text{eq}}(\mathbf{r})$ . A medida que os potenciais dos contatos são incrementados,  $U(\mathbf{r})$  é modificado, assim como as ressonâncias do condutor e o limiar de abertura dos canais. Supondo que os potenciais aplicados não acrescentem novos processos físicos ao problema de transporte, como por exemplo interação com fônons, a Eq. (3.52) pode ser generalizada na forma

$$S_{mn}(E, U(\mathbf{r})) = \delta_{mn} - 2\pi i \sum_{\mu\nu} (\rho_n \rho_m)^{1/2} V_{\mu m}^* [G^r(E)]_{\mu\nu} V_{\nu n}. \quad (3.53)$$

Aqui a função de Green do condutor  $G^r$  contém o potencial de não-equilíbrio  $U(\mathbf{r})$ .

Lembrando a definição da largura de decaimento  $\Gamma$ , obtemos [89]

$$A_{\alpha\beta} = \text{Tr} \left[ \mathbf{1}_\alpha \delta_{\alpha\beta} - \mathbf{S}_{\alpha\beta}^\dagger \mathbf{S}_{\alpha\beta} \right] = -T_{\alpha\beta} \quad (3.54)$$

onde concluímos que o formalismo de funções de Green e o formalismo de matrizes de espalhamento produzem expressões equivalentes para a corrente.

Agora examinaremos como o potencial  $U(\mathbf{r})$  é tratado nos dois formalismos, ou seja, compararemos as Eqs. (3.13) e (3.42).

Começaremos comparando as expressões para a injetividade. Fazendo explicitamente a soma sobre canais, a injetividade em termos de matrizes de espalhamento (3.8) se escreve

$$\frac{dn^s(\mathbf{r}, \alpha)}{dE} = -\frac{1}{2\pi i} \sum_{\beta} \int \frac{dE}{2\pi} \left( -\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) \sum_{\substack{n \in \alpha \\ m \in \beta}} \left[ S_{mn}^\dagger \frac{\delta S_{mn}}{e\delta U(\mathbf{r})} - \frac{\delta S_{mn}^\dagger}{e\delta U(\mathbf{r})} S_{mn} \right], \quad (3.55)$$

calculada com  $\{V_\gamma\} = 0$ . A Eq. (3.53) estabelece a ponte entre os dois formalismos e proporciona um caminho fácil para calcular a derivada funcional  $\delta S_{mn}^\dagger / \delta U(\mathbf{r})$ . Inicialmente, empregamos  $G^r \delta[(G^r)^{-1}] + (\delta G^r)(G^r)^{-1} = 0$  para escrever

$$\frac{\delta S_{mn}}{e\delta U(\mathbf{r})} = +2\pi i (\rho_n \rho_m)^{1/2} \sum_{\mu\mu'\nu\nu'} V_{\mu m}^* [G^r(E)]_{\mu\mu'} \frac{\delta [G^r(E)^{-1}]_{\mu'\nu'}}{e\delta U(\mathbf{r})} [G^r(E)]_{\nu'\nu} V_{\nu n}. \quad (3.56)$$

Em seguida, notando que  $(G^r)^{-1} = E - H_0 - eU + i\Gamma/2$  e  $U_{\mu\nu} = \int d\mathbf{r}' \langle \mu | \mathbf{r}' \rangle U(\mathbf{r}') \langle \mathbf{r}' | \nu \rangle$ , escrevemos

$$\frac{\delta}{e\delta U(\mathbf{r})} [G^r(E)^{-1}]_{\mu\nu} = -\langle \mu | \mathbf{r} \rangle \langle \mathbf{r} | \nu \rangle. \quad (3.57)$$

Finalmente, introduzindo as Eqs. (3.52) e (3.56) em (3.55), mostramos que  $dn^s(\mathbf{r}, \alpha)/dE$  coincide exatamente com a Eq. (3.41), obtida na aproximação de banda larga.

Seguindo os mesmos passos, também encontramos que a emissividade no formalismo de matrizes de espalhamento é dada por

$$\frac{dn(\alpha, \mathbf{r})}{dE} = 2 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dE}{2\pi} \left( -\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) \langle \mathbf{r} | G_0^a \Gamma_\alpha G_0^r | \mathbf{r} \rangle. \quad (3.58)$$

A aproximação de Thomas-Fermi é crucial para fechar o mecanismo de cálculo no formalismo de matrizes de espalhamento. A idéia é assumir que  $u_\alpha(\mathbf{r})$  depende mais fracamente das coordenadas do que  $\Pi(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ , e desta forma escrever

$$\begin{aligned} \int_{\mathcal{V}} d\mathbf{r}' \Pi(\mathbf{r}, \mathbf{r}') u_\alpha(\mathbf{r}') &\approx u_\alpha(\mathbf{r}) \int_{\mathcal{V}} d\mathbf{r}' \Pi(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \\ &\approx u_\alpha(\mathbf{r}) \frac{dn(\mathbf{r})}{dE} \end{aligned} \quad (3.59)$$

onde usamos a Eq. (3.43). Neste limite, a equação de Poisson do potencial na aproximação de Hartree do formalismo de funções de Green (3.42) reduz à correspondente equação de Poisson no formalismo de matrizes de espalhamento (3.13). É interessante notar que a parte diagonal do  $\Pi(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$  pode ser escrita como

$$\Pi(\mathbf{r}, \mathbf{r}) = -2i \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dE}{2\pi} \left( -\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) \left[ \langle \mathbf{r} | G_0^a(E) - G_0^r(E) | \mathbf{r} \rangle \right]$$

que, integrando por partes e usando a Eq. (3.34), nos fornece

$$\Pi(\mathbf{r}, \mathbf{r}) = \sum_{\alpha} \frac{dn(\alpha, \mathbf{r})}{dE}. \quad (3.60)$$

Note que a Eq. (3.51) coincide com a sua análoga do FMS na aproximação de Thomas-Fermi [77]. Isto sugere que, dentro das aproximações discutidas nesta seção, ambos formalismos são equivalentes em todas as ordens.

### 3.4 Implementação da aproximação de Hartree-Fock no FFG.

A fim de ilustrar as vantagens obtidas ao utilizar funções de Green para descrever o problema de transporte não-linear, nesta seção estaremos aprimorando a nossa descrição da interação eletrônica ao considerar a aproximação de Hartree-Fock. Note que isto é simples neste formalismo devido ao fato das funções de Green serem objetos que incorporam naturalmente fenômenos de muitos corpos. Note também que a natureza não-local da interação de troca (esta é justamente a diferença entre HF e Hartree) impede a sua

inclusão na descrição do transporte não linear em termos dos potenciais característicos definidos na Eq. (3.3). Porém, como antes, é igualmente possível construir uma expansão auto-consistente para a corrente. Consideremos o hamiltoniano de interação

$$H_{\text{Int}} = \frac{1}{2} \sum_{ss'} \sum_{\mu\nu\gamma\delta} H_{\mu\nu\gamma\delta} d_{\mu s}^\dagger d_{\nu s'}^\dagger d_{\gamma s'} d_{\delta s}, \quad (3.61)$$

com

$$H_{\mu\nu\gamma\delta} = \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 V(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \phi_\mu^*(\mathbf{r}_1) \phi_\nu^*(\mathbf{r}_2) \phi_\gamma(\mathbf{r}_2) \phi_\delta(\mathbf{r}_1), \quad (3.62)$$

que, na aproximação de Hartree-Fock, se escreve [90]

$$H_{\text{Int}}^{HF} = \sum_{\substack{\mu\nu\gamma\delta \\ ss'}} H_{\mu\nu\gamma\delta} \left[ \langle d_{\mu s}^\dagger d_{\delta s} \rangle d_{\nu s'}^\dagger d_{\gamma s'} - \langle d_{\mu s}^\dagger d_{\gamma s'} \rangle d_{\nu s'}^\dagger d_{\delta s} \right. \\ \left. + 1/2 \langle d_{\mu s}^\dagger d_{\delta s} \rangle \langle d_{\nu s'}^\dagger d_{\gamma s'} \rangle - 1/2 \langle d_{\mu s}^\dagger d_{\gamma s'} \rangle \langle d_{\nu s'}^\dagger d_{\delta s} \rangle \right]. \quad (3.63)$$

Como o hamiltoniano de interação é bilinear, é trivial inclui-lo na função de Green, obtendo-se

$$\tilde{\mathbf{G}}^{r(a)}(E) = [(\mathbf{G}^{r(a)}(E))^{-1} - \mathbf{H}_{\text{Int}}^{HF}]^{-1}, \quad (3.64)$$

onde os elementos de matriz do hamiltoniano de interação são dados por

$$[H_{\text{Int}}^{HF}]_{\nu s, \gamma s'} = \delta_{s, s'} \sum_{\mu\delta} \left[ H_{\mu\nu\gamma\delta} \sum_{s''} \langle d_{\mu s''}^\dagger d_{\delta s''} \rangle - H_{\mu\nu\delta\gamma} \langle d_{\mu s}^\dagger d_{\delta s} \rangle \right]. \quad (3.65)$$

A função de Green de correlação é dada por

$$\tilde{\mathbf{G}}^<(E) = \tilde{\mathbf{G}}^r(E) \mathbf{\Sigma}^<(E) \tilde{\mathbf{G}}^a(E) \quad (3.66)$$

e a equação que define a auto consistência é

$$\langle d_{\mu s}^\dagger d_{\nu s'} \rangle = -i \int \frac{dE}{2\pi} \tilde{G}_{\nu s' \mu s}^<(E) = -i \delta_{ss'} \int \frac{dE}{2\pi} \tilde{G}_{\nu\mu}^<(E). \quad (3.67)$$

A invariância de calibre pode ser demonstrada utilizando os mesmos argumentos da Seção 3.2.

As eqs. (3.64), (3.66) e (3.67) fornecem os elementos necessários para escrever a expansão de  $I_\alpha$ , em analogia com a Seção 3.2. A natureza não local da interação de troca encontra-se codificada nas Eqs. (3.62) e (3.63).

# Capítulo 4

## Condutância de um anel de Aharonov-Bohm

Neste capítulo estaremos interessados em fazer contato com os resultados experimentais da Ref. [12]. Para tal fim, empregaremos um modelo simples de anel quântico [91] que nos permitirá calcular tanto a matriz de espalhamento do anel, quanto a sua derivada funcional. Uma vez obtidas estas quantidades usaremos a descrição do transporte não linear desenvolvida por Büttiker e colaboradores [16] para calcular a condutância não linear. Finalmente, será discutida a possibilidade de usar a condutância não linear para se fazer interferometria.

### 4.1 Resultados experimentais de interesse.

Começamos o capítulo dedicando esta seção à descrição dos resultados experimentais obtidos pelo grupo liderado pelo Prof. Klaus Ensslin (ETH-Suíça) e apresentados nas Ref. [12]. Mais informação sobre o experimento e experimentos similares encontram-se nas Refs. [93, 94, 95].

O anel usado no experimento foi desenhado oxidando localmente, com um microscópio de força atômica, uma heteroestrutura de GaAs/GaAlAs. A Fig. 4.1(a) apresenta uma imagem do anel resultante obtida com o mesmo microscópio. Embora o anel esteja conectado a três terminais, o experimento foi realizado com um deles totalmente fechado, e sendo monitorado o tempo todo.

A parte não linear de uma característica  $I - V$  típica, é apresentada na Fig. 4.1(b) para dois valores do campo magnético de amplitudes iguais, porém de sinais opostos. A

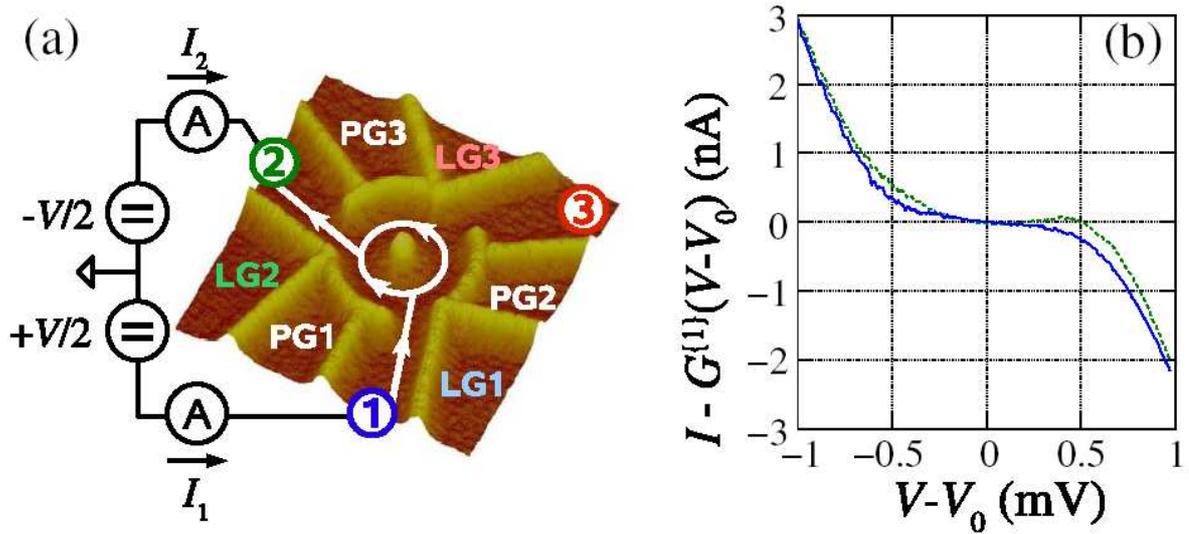


Figura 4.1: (a) Imagem microscópica (microscópio de força atômica) do anel e esquema da montagem experimental usada na Ref. [12]. O terceiro contato foi fechado a fim de trabalhar unicamente com dois contatos. (b) Parte não linear de uma característica  $I - V$  típica para dois valores do campo magnético de amplitudes iguais, porém de sinais opostos [12].

curva mostra claramente a aparição de um comportamento não linear para diferenças de voltagem acima de  $0.1\text{mV}$ . Também fica evidente que a corrente não é mais simétrica em campo magnético,  $I(B) \neq I(-B)$ , o que representa uma violação das relações de Onsager-Cassimir discutidas na seção 3.2.1.

A fim de quantificar o comportamento não linear, os autores ajustaram um polinômio de quinta ordem às curvas  $I - V$ , segundo

$$I = \sum_{n=1}^5 G^{(n)}(V - V_0)^n, \quad (4.1)$$

sendo  $G^{(n)}$  e  $V_0$  os parâmetros de ajuste. O resultado dos parâmetros de ajuste  $G^{(n)}$  como função do campo magnético e com os potenciais das portas fixos são apresentadas na Fig. 4.2(a). As curvas tracejadas correspondem à reflexão horizontal das curvas originais e tem a finalidade de facilitar a observação da simetria baixo reflexão do campo magnético.

Todas as condutâncias  $G^{(n)}$  apresentam oscilações de Aharonov-Bohm com período consistente com o diâmetro litográfico do anel ( $260\text{nm}$ ). Adicionalmente a estas oscilações ( $h/e$ ), os coeficientes ímpares ( $G^{(1,3,5)}$ ) apresentam fortes oscilações de período

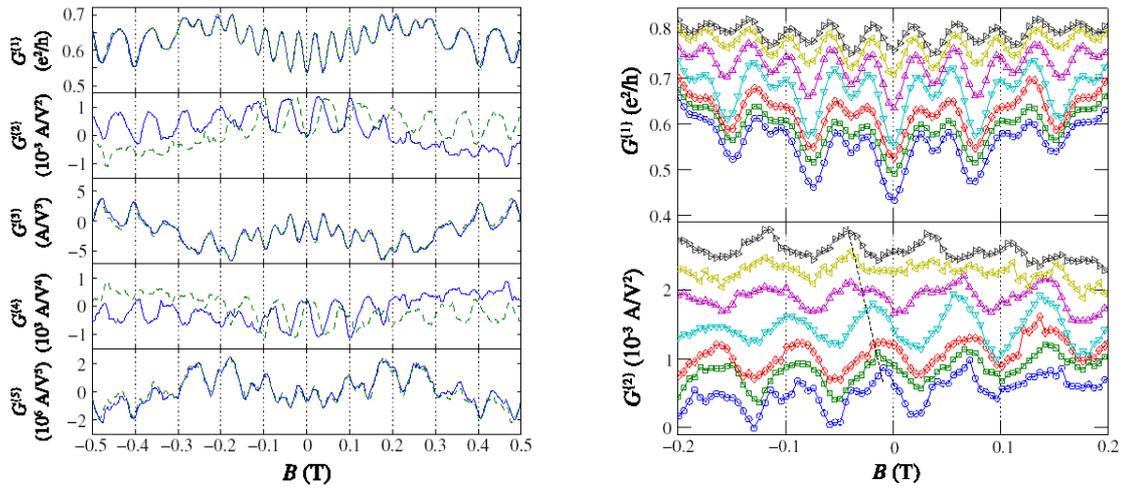


Figura 4.2: (a) Contribuições de diferentes ordens à condutância não linear do anel. (b) Acima, a rigidez de fase presente na condutância linear. Embaixo, a quebra desta rigidez na primeira contribuição não linear [12].

$h/2e$ . A presença de tais oscilações unicamente nos coeficientes ímpares é uma das perguntas em aberto.

No que diz respeito à paridade da condutância como função do campo magnético, a Ref. [12] reporta que a condutância linear  $G^{(1)}$  é, em consistência com a teoria, par por inversão do campo magnético. Já as condutâncias não lineares apresentam comportamentos diferentes. Os coeficientes pares não mostraram uma simetria definida, enquanto que os coeficientes ímpares exibem um comportamento par no campo magnético. Esta é uma outra questão aberta neste experimento.

Na Fig. 4.2(b) são mostradas as condutâncias de primeira e segunda ordem, como função do campo magnético, para valores dos potenciais de porta  $V_{PG2} = V_{PG3}$  compreendidos entre  $+0.125 V$  (curva inferior) e  $-0.025 V$  (curva superior). As curvas estão deslocadas verticalmente para mais clareza. A idéia por trás deste gráfico é que um aumento nos potenciais das portas  $PG2$  e  $PG3$  produz um aumento na densidade de carga no braço superior do anel Fig. 4.1(a), causando um aumento na fase dos elétrons que percorrem este braço. Desta forma, ao se variar tais potenciais se pretende estudar a possibilidade de se fazer interferometria não linear num anel com dois contatos. O gráfico superior mostra que a condutância linear apresenta um comportamento par e a conseqüente rigidez de fase que impossibilita a interferometria (linear) num anel de dois contatos. No entanto, a gráfica inferior mostra como a condutância  $G^{(2)}$  apresenta uma defasagem na medida que os potenciais de porta são variados. Isto abre a possibilidade

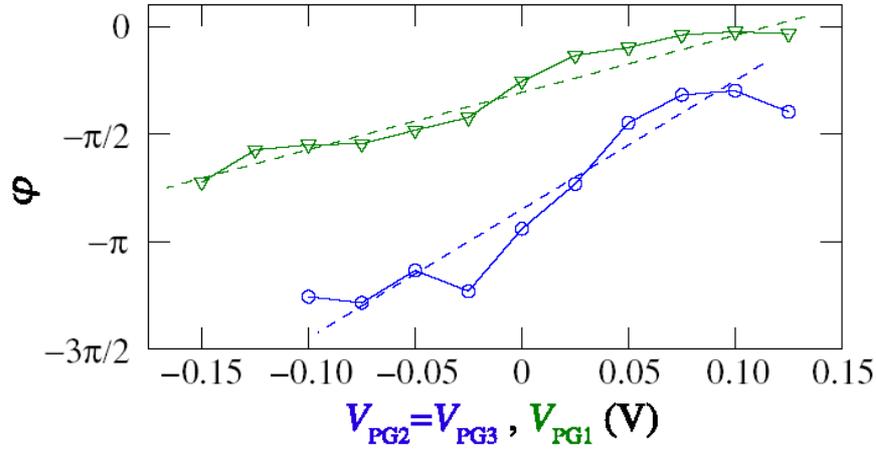


Figura 4.3: Fase das oscilações em campo magnético de  $G^{(2)}$  como função de  $V_{PG2} = V_{PG3}$  com  $V_{PG1} = 0$  (círculos) e como função de  $V_{PG1}$  com  $V_{PG2} = V_{PG3} = 0$  (triângulos). As linhas tracejadas indicam a tendência linear dos pontos com inclinações de  $0.85 \pi/V$  (triângulos) e  $1.90 \pi/V$  (círculos) (gráfica extraída da Ref. [12]).

de fazer interferometria de dois contatos por meio da condutância não-linear. Este é um dos pontos que nos dispomos a investigar neste capítulo.

Observe-se que as variações na forma das curvas da condutância  $G^{(2)}$  dificultam a identificação da defasagem. Por isto é conveniente calcular a defasagem do que seria o primeiro harmônico da condutância, o qual está relacionado com trajetórias com uma única volta em torno do anel. Esta defasagem se calcula por meio da seguinte fórmula:

$$\tan(\phi) = \frac{\langle G^{(2)}(B) \sin(B/B_0) \rangle}{\langle G^{(2)}(B) \cos(B/B_0) \rangle}, \quad (4.2)$$

onde  $B_0 = h/e$  é o período das oscilações de Aharonov-Bohm e  $\langle \dots \rangle$  indica que há de se tomar o valor médio.

A Fig 4.3 exibe a variação da defasagem calculada com a Eq. (4.2) em função dos potenciais de porta correspondentes a ambos braços. O fato de ambos braços apresentarem uma tendência monotônica (crescente neste caso particular) é um resultado em favor da possibilidade de empregar a condutância não linear para fazer interferometria. Além disso, note que a taxa média de aumento do braço superior é aproximadamente o dobro da taxa média de aumento do braço inferior, o que é consistente com o comprimento dos braços. Porém, é estranho que ambas curvas apresentem um comportamento crescente, quando se esperaria que apresentassem tendências opostas. Lembre-se que uma defasagem positiva num braço corresponde a uma defasagem negativa no outro.

Para finalizar, gostaríamos de destacar as quatro observações experimentais que abordaremos neste capítulo. (i) As propriedades de simetria por inversão do campo magnético dos diferentes termos da condutância. (ii) A ausência de oscilações de período  $h/2e$  nos coeficientes  $G^{(2,4)}$ . (iii) A possibilidade de usar a condutância não linear para se fazer interferometria com dois contatos. (iv) Justificativa de o por que as duas inclinações na Fig. 4.3 tem o mesmo sinal.

## 4.2 Modelo do anel quântico

O modelo que usaremos para descrever o anel quântico é composto por duas peças, a propagação ao longo dos braços, e o espalhamento nos vértices formados pelos contatos e o anel. Com a finalidade de mantermos o modelo o mais simples possível, consideraremos a propagação livre nos braços. Embora seja possível considerar vários canais sem maiores dificuldades, por simplicidade nossos cálculos são realizados com um único canal aberto em cada contato.

Matematicamente os vértices são representados por meio de matrizes de espalhamento. A matriz de espalhamento de um vértice que conserva o fluxo de carga tem de ser uma matriz unitária, o que significa que os vértices estarão representados por elementos do grupo  $U(3)$ . Considerando que o efeito do campo magnético sobre os elétrons é desprezível para a escala de tamanho dos vértices, podemos supor que a matriz seja simétrica. Ademais, como qualquer ganho de fase dos elétrons pode ser incluído na propagação nos braços é possível escolher uma matriz real. Finalmente, por simplicidade, impomos que o vértice divida o fluxo eletrônico de forma simétrica entre os dois braços do anel. O resultado de tais considerações é a matriz uniparamétrica

$$\begin{pmatrix} a & \epsilon^{1/2} & \epsilon^{1/2} \\ \epsilon^{1/2} & \frac{1}{2}(\pm 1 - a) & \frac{1}{2}(\mp 1 - a) \\ \epsilon^{1/2} & \frac{1}{2}(\mp 1 - a) & \frac{1}{2}(\pm 1 - a) \end{pmatrix} \quad (4.3)$$

onde  $a = \pm(\sqrt{1 - 2\epsilon})$ , e o parâmetro  $\epsilon$  ( $\in [0, 1/2]$ ) permite ajustar a transparência do vértice. O valor  $\epsilon = 0$  corresponde a transparência nula (reflexão total), enquanto que  $\epsilon = 1/2$  corresponde a transparência 1 (transmissão total). A escolha do sinal na equação (4.3) determina o sinal do determinante da matriz (escolheremos o sinal inferior que corresponde a um determinante +1), entanto que a escolha do sinal em “ $a$ ” esta relacionada com o tipo de interface presente no vértice. Como estamos interessados em

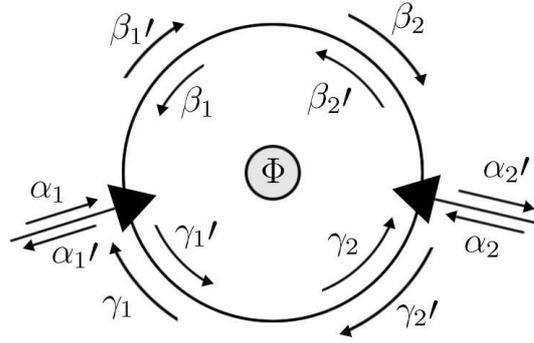


Figura 4.4: Representação esquemática do anel quântico com as respectivas amplitudes de onda nas vizinhanças dos vértices.

vértices abertos ( $\epsilon = 1/2 \rightarrow a = 0$ ) a escolha do sinal em “a” é irrelevante. Note-se que a Eq. (4.3) apresenta uma correção nos sinais dados na Ref. [91].

Em termos da notação introduzida na Fig. 4.4 a propagação nos braços do anel é dada pelas matrizes de transmissão  $T_{l_i}$  definidas abaixo

$$\begin{pmatrix} \beta_2 \\ \beta_2' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{i(k_L l_1 - \phi_1)} & 0 \\ 0 & e^{-i(k_L l_1 + \phi_1)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \beta_1' \\ \beta_1 \end{pmatrix} = T_{l_1} \begin{pmatrix} \beta_1' \\ \beta_1 \end{pmatrix} \quad (4.4)$$

e

$$\begin{pmatrix} \gamma_1 \\ \gamma_1' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{i(k_L l_2 - \phi_2)} & 0 \\ 0 & e^{-i(k_L l_2 + \phi_2)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \gamma_2' \\ \gamma_2 \end{pmatrix} = T_{l_2} \begin{pmatrix} \gamma_2' \\ \gamma_2 \end{pmatrix} \quad (4.5)$$

onde  $l_{i=1,2}$  são os comprimentos dos braços,  $\phi_{i=1,2}$  são as fases de Aharonov-Bohm acumuladas ao longo de cada braço, e  $k_L = \sqrt{2mE_F - \hbar^2 k_T^2} / \hbar$  é a componente longitudinal do vetor de onda. Por outro lado, a equação dos vértices

$$\begin{pmatrix} \alpha_i' \\ \beta_i' \\ \gamma_i' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a & \epsilon^{1/2} & \epsilon^{1/2} \\ \epsilon^{1/2} & \frac{1}{2}(1-a) & -\frac{1}{2}(1+a) \\ \epsilon^{1/2} & -\frac{1}{2}(1+a) & \frac{1}{2}(1-a) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_i \\ \beta_i \\ \gamma_i \end{pmatrix} \quad (4.6)$$

nos fornece a matriz de transmissão entre braços.

$$\begin{pmatrix} \beta_1' \\ \beta_1 \end{pmatrix} = \frac{2\epsilon^{1/2}}{1+a} \begin{pmatrix} -1 \\ -1 \end{pmatrix} \alpha_1 - \frac{2}{1+a} \begin{pmatrix} a & a \\ -a & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \gamma_1 \\ \gamma_1' \end{pmatrix} = \alpha_1 \vec{w}_1 + T_{v_1} \begin{pmatrix} \gamma_1 \\ \gamma_1' \end{pmatrix}, \quad (4.7)$$

$$\begin{pmatrix} \gamma'_2 \\ \gamma_2 \end{pmatrix} = \frac{2\epsilon^{1/2}}{1+a} \begin{pmatrix} -1 \\ -1 \end{pmatrix} \alpha_2 - \frac{2}{1+a} \begin{pmatrix} a & a \\ -a & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \beta_2 \\ \beta'_2 \end{pmatrix} = \alpha_2 \vec{w}_2 + T_{v_2} \begin{pmatrix} \beta_2 \\ \beta'_2 \end{pmatrix} \quad (4.8)$$

e a equação para as amplitudes de saída nos contatos

$$\alpha'_i = a \alpha_i + \epsilon^{1/2}(\beta_i + \gamma_i) \quad (i = 1, 2). \quad (4.9)$$

Uma vez definidos todos estes elementos, podemos calcular a matriz de espalhamento total. O primeiro passo consiste em calcular as amplitudes internas como função das amplitudes entrantes nos contatos, para isto solucionamos o sistema de equações formado por (4.4), (4.5), (4.7) e (4.8), com o qual obtemos

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} \beta'_1 \\ \beta_1 \end{pmatrix} &= [1 - T_{v_1} T_{l_2} T_{v_2} T_{l_1}]^{-1} (\vec{w}_1 \alpha_1 + T_{v_1} T_{l_2} \cdot \vec{w}_2 \alpha_2) \\ \begin{pmatrix} \beta_2 \\ \beta'_2 \end{pmatrix} &= [1 - T_{l_1} T_{v_1} T_{l_2} T_{v_2}]^{-1} (T_{l_1} \cdot \vec{w}_1 \alpha_1 + T_{l_1} T_{v_1} T_{l_2} \cdot \vec{w}_2 \alpha_2) \\ \begin{pmatrix} \gamma'_2 \\ \gamma_2 \end{pmatrix} &= [1 - T_{v_2} T_{l_1} T_{v_1} T_{l_2}]^{-1} (\vec{w}_2 \alpha_2 + T_{v_2} T_{l_1} \cdot \vec{w}_1 \alpha_1) \\ \begin{pmatrix} \gamma_1 \\ \gamma'_1 \end{pmatrix} &= [1 - T_{l_2} T_{v_2} T_{l_1} T_{v_1}]^{-1} (T_{l_2} \cdot \vec{w}_2 \alpha_2 + T_{l_2} T_{v_2} T_{l_1} \cdot \vec{w}_1 \alpha_1) \end{aligned} \quad (4.10)$$

Em seguida, a equação (4.9) nos permite calcular as amplitudes de saída. Escolhendo apropriadamente as amplitudes de entrada obtemos as componentes da matriz de espalhamento:

$$\begin{aligned} \alpha_1 = 1 & \quad \rightarrow \quad S_{11} = \alpha'_1 \\ \alpha_2 = 0 & \quad \rightarrow \quad S_{12} = \alpha'_2 \end{aligned} \quad (4.11)$$

e

$$\begin{aligned} \alpha_1 = 0 & \quad \rightarrow \quad S_{21} = \alpha'_1 \\ \alpha_2 = 1 & \quad \rightarrow \quad S_{22} = \alpha'_2 \end{aligned} \quad (4.12)$$

A Figura 4.5 ilustra a probabilidade de transmissão  $|T_{12}|^2$  e de reflexão  $|T_{11}|^2$  como função do fluxo magnético. A condutância linear obtida com estes coeficientes é apresentada na Fig. 4.6.

Como discutido no capítulo anterior, a condutância não linear depende da derivada funcional da matriz de espalhamento  $\delta S / \delta U(x)$ . Para calcular  $\delta S / \delta U(x)$ , introduzimos uma função delta de Dirac na posição indicada por  $x$  no braço correspondente. Aqui,  $x \in [0, 1]$  é uma variável que percorre o anel em sentido horário e partindo do vértice

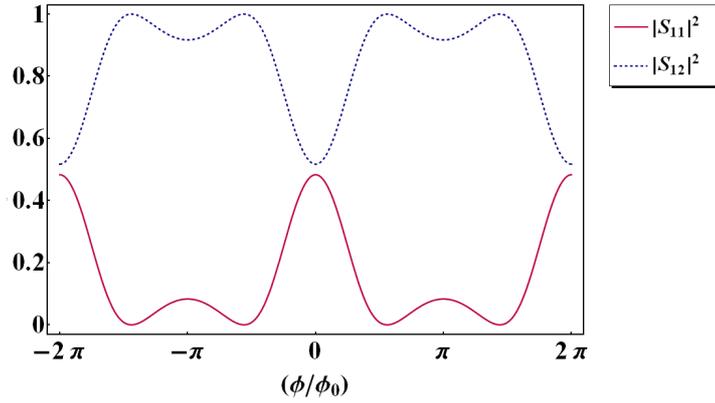


Figura 4.5: Módulo quadrado da amplitude de probabilidade de transmissão e reflexão ( $|S_{12}|^2$  e  $|S_{11}|^2$ ) para o modelo descrito, como função do fluxo magnético.

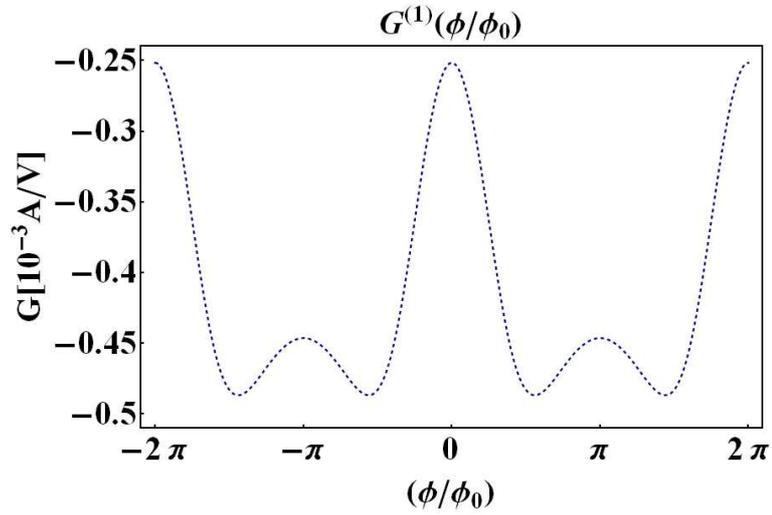


Figura 4.6: Condutância linear calculada a partir da matriz de espalhamento do modelo.

1. O espalhamento produzido pela presença da função delta é incorporado ao cálculo substituindo a matriz  $T_{l_1}$  por  $T_{\delta_1}$  se  $0 < x L < l_1$  ou  $T_{l_2}$  por  $T_{\delta_2}$  se  $l_1 < x L < L$ . Com  $L = l_1 + l_2$  e  $T_{\delta_i}$  dado por

$$T_{\delta_i} = \frac{i}{k_L} e^{i\phi_i} \begin{pmatrix} -(ik_L + \Omega)e^{ik_L l_i} & -\Omega e^{ik_L(l_i - 2x_i)} \\ \Omega e^{-ik_L(l_i - 2x_i)} & (\Omega - ik_L)e^{-ik_L l_i} \end{pmatrix}. \quad (4.13)$$

Aqui  $x_{i=1} = x L$ ,  $x_{i=2} = (1 - x) L$  e  $\Omega$  representa a amplitude da delta de Dirac. Finalmente, calculamos a derivada funcional segundo

$$\frac{\delta S_{\alpha\beta}}{\delta U(x)} = \lim_{\Omega \rightarrow 0} \frac{S_{\alpha\beta}(U(y) + \Omega \delta(y - x)) - S_{\alpha\beta}(U(y))}{\Omega}. \quad (4.14)$$

### 4.3 Injetividade e emissividade

Uma vez calculada a matriz de espalhamento e a derivada funcional, passamos ao cálculo da injetividade

$$\frac{dn_{\alpha}^i(\mathbf{r})}{dE} = -\frac{1}{4\pi i} \sum_{\beta} \text{Tr} \left[ \mathbf{S}_{\beta\alpha}^{\dagger} \frac{\delta \mathbf{S}_{\beta\alpha}}{e\delta U(\mathbf{r})} - \frac{\delta \mathbf{S}_{\beta\alpha}^{\dagger}}{e\delta U(\mathbf{r})} \mathbf{S}_{\beta\alpha} \right] \quad (4.15)$$

e da emissividade

$$\frac{dn_{\alpha}^e(\mathbf{r})}{dE} = -\frac{1}{4\pi i} \sum_{\beta} \text{Tr} \left[ \mathbf{S}_{\alpha\beta}^{\dagger} \frac{\delta \mathbf{S}_{\alpha\beta}}{e\delta U(\mathbf{r})} - \frac{\delta \mathbf{S}_{\alpha\beta}^{\dagger}}{e\delta U(\mathbf{r})} \mathbf{S}_{\alpha\beta} \right] \quad (4.16)$$

Onde tomamos o limite de temperatura nula a fim de simplificar os cálculos.

A Fig. 4.7 apresenta as injetividades dos contatos 1 e 2, respectivamente, para os valores do fluxo magnético  $\phi/\phi_0 = \pm\pi/4$ . Analogamente, a Fig. 4.8 apresenta as emissividades dos contatos 1 e 2 nas mesmas condições. Para estes gráficos usamos os seguintes parâmetros:

- Perímetro do anel  $L = \pi \times 260 \text{ nm}$ ,  $l_1 = L/3$  e  $l_2 = 2L/3$ .
- Vetor de onda  $k_{Fermi} = [2m_e(E_{Fermi} - E_T)]^{1/2} / \hbar$ , com a energia de Fermi dada por  $E_{Fermi} = (\hbar 1.58 \times 10^6)^2 / 2m_e$  e a energia do modo transversal estimada em  $E_T = (\hbar^2 / 2m_e)(n_T + 1)(6\pi / 260 \times 10^{-7})^2$ . Para fazer esta estimativa supomos que a seção transversal do potencial é um oscilador harmônico de largura característica igual a um sexto do diâmetro litográfico do anel.

Estes valores foram escolhidos em consonância com os valores do arranjo experimental [12]. Nós trabalhamos com o modo transversal  $n_T = 3$  a fim de diminuir o número de oscilações e desta forma fazer com que os gráficos sejam mais fáceis de visualizar. Vale lembrar que no experimento de Ensslim estima-se que hajam 4 canais abertos.

As curvas tanto da injetividade quanto da emissividade apresentam comportamentos similares: descontinuidades nos pontos  $x = 0$  e  $x = l_1/(l_1 + l_2) = 1/3$ , com platôs e amplitudes de oscilação diferentes para cada braço. As descontinuidades acontecem na posição dos vértices e estão relacionadas ao fato de que a conservação de carga neste ponto requer que os três elementos (braços e contato) sejam considerados. Os platôs indicam o tanto de carga que está fluindo por cada braço, enquanto que as oscilações estão relacionadas com "localização" de carga. Por último, é importante destacar que a condição  $dn_{\alpha}^i(B)/dE = dn_{\alpha}^e(-B)/dE$  relacionada à simetria de inversão temporal, é visivelmente satisfeita. Também foi verificado que a condição  $dn^i(B)/dE = dn^e(B)/dE$  é satisfeita.

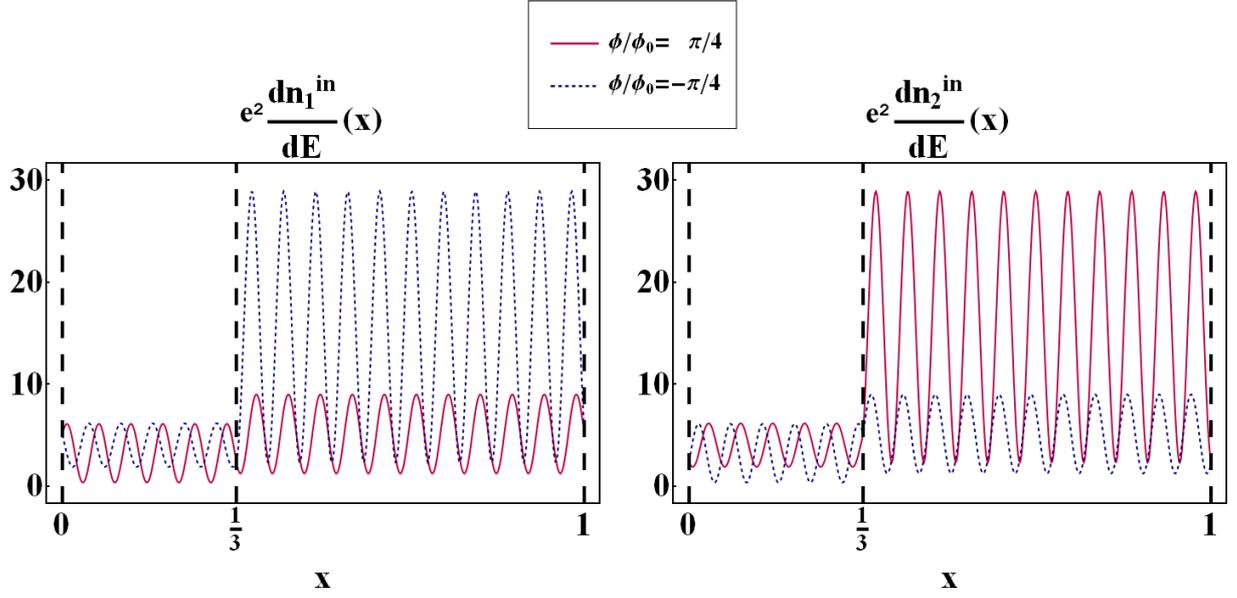


Figura 4.7: Injetividades 1 e 2 para valores do campo magnético  $\pm B$  correspondentes aos fluxos magnético de  $\pm\pi/4$ . O fator de  $e^2$  foi acrescentado a fim de se obter uma quantidade adimensional.

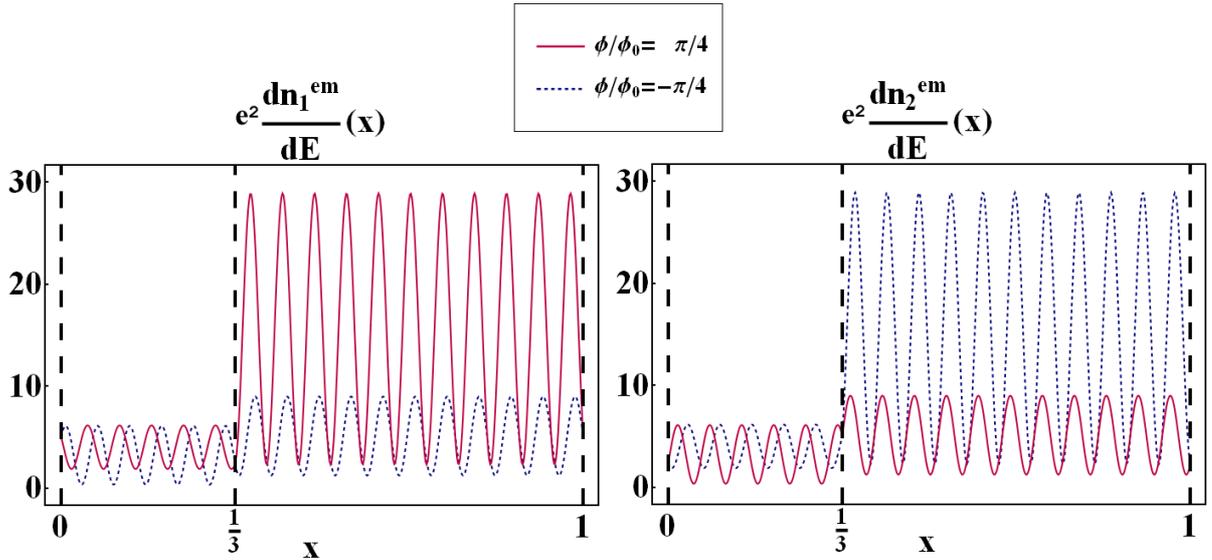


Figura 4.8: Emissividades 1 e 2 para valores do campo magnético  $\pm B$  correspondentes aos fluxos magnéticos de  $\phi/\phi_0 = \pm\pi/4$ . O fator de  $e^2$  foi acrescentado a fim de se obter uma quantidade adimensional.

## 4.4 Potenciais característicos

Para o cálculo dos potenciais característicos precisamos resolver a equação de Poisson [23]

$$-\nabla^2 u_\alpha(\mathbf{r}) + 4\pi e^2 \frac{dn(\mathbf{r})}{dE} u_\alpha(\mathbf{r}) = 4\pi e^2 \frac{dn(\mathbf{r}, \alpha)}{dE}, \quad (4.17)$$

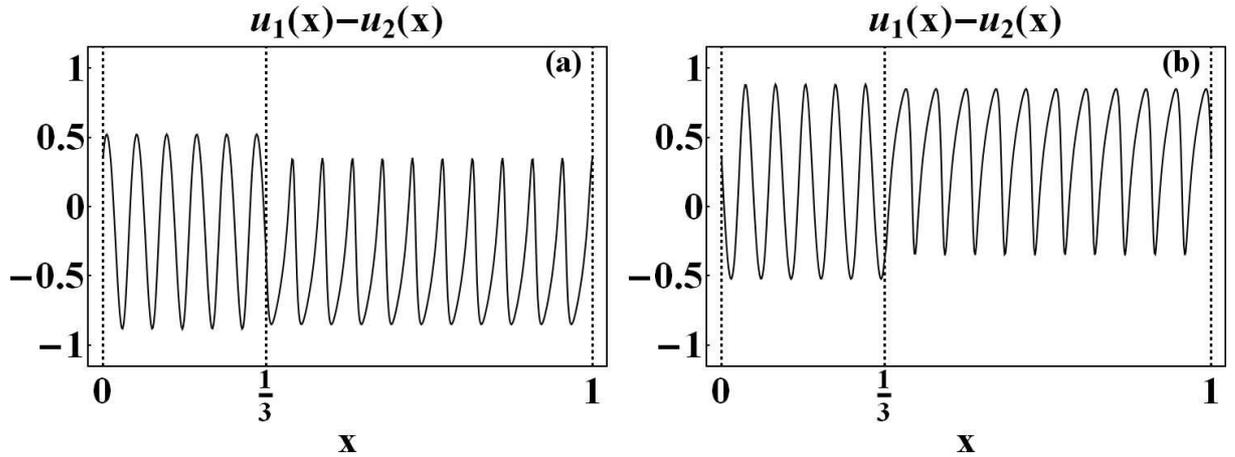


Figura 4.9: Diferença entre os potenciais característicos,  $u_1(x) - u_2(x)$ , como função da variável que percorre o anel  $x \in [0, 1]$ , para valores conjugados de fluxo magnético  $\phi/\phi_0 = \pm\pi/4$ .

mas antes disso, é preciso incorporar a função resposta dos elétrons do semiconductor onde o anel foi litografado. Uma forma de se fazer isto, é acrescentando um termo, tanto de injetividade  $dn_0^i/dE$  quanto de emissividade  $dn_0^e/dE$ , que representa a resposta deste material aos câmbios nas distribuições locais de carga. Este procedimento é descrito na Ref. [23].

Uma outra alternativa, consiste em empregar uma função de Green efetiva para a equação de Poisson, a qual considera a polarizabilidade do material do substrato. Nós optamos por este último método empregando a aproximação de interação de contato, o que nos permite escrever uma solução algébrica para  $u_\alpha$ ,

$$u_\alpha = \frac{4\pi e^2 dn_\alpha^i/dE}{\kappa_{cont} + 4\pi e^2 dn^e/dE}. \quad (4.18)$$

Nesta aproximação a constante adimensional  $\kappa_{cont}$  contem a informação sobre o mascaramento de cargas no material. Este fenômeno tem sido estudado por exemplo em gases bidimensionais [92]. Porém aqui não será preciso aprofundar neste assunto, já que a invariância de calibre exige que  $\kappa_{cont} \ll 4\pi e^2 dn^e/dE \approx 10$ , o que deixa  $\kappa_{cont}$  como uma constante que regulariza as possíveis divergências do potencial característico resultante. Assim, o potencial característico é independente do valor de  $\kappa_{cont}$ , sempre que este seja bem menor do que a emissividade.

Como estamos interessados num dispositivo de dois contatos, e com uma ddp aplicada em forma simétrica ( $V_1 = V/2$  e  $V_2 = -V/2$ ), precisamos apenas conhecer a diferença

$(u_1 - u_2)$ , que é dada por

$$u_1 - u_2 = \frac{4\pi e^2 (dn_1^i/dE - dn_2^i/dE)}{\kappa_{cont} + 4\pi e^2 dn^e/dE}. \quad (4.19)$$

A diferença  $(u_1 - u_2)$  obtida com esta aproximação é apresentada na Fig. 4.9.

## 4.5 Condutância não linear $G^{(2)}$

Tendo calculado a matriz de espalhamento, a sua derivada funcional e os potenciais característicos, basta introduzirmos estas quantidades na Eq. (3.7) e calcular a integral correspondente, para obtermos a condutância de segunda ordem. O resultado deste cálculo é apresentado na Fig. 4.10.

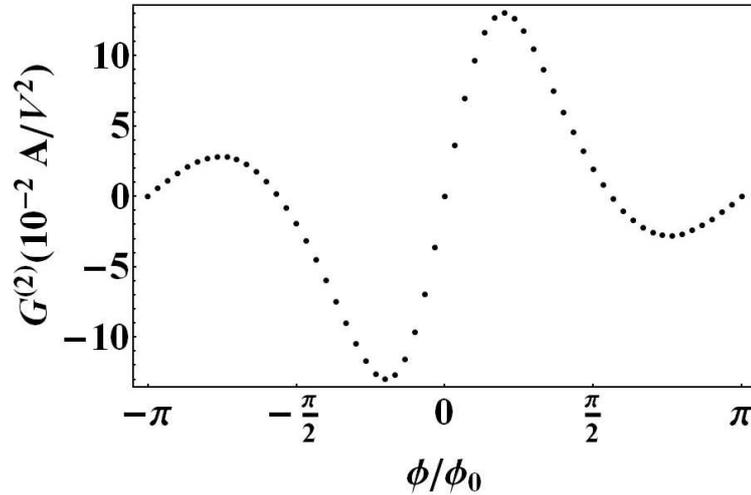


Figura 4.10: Condutância não linear  $G^{(2)}$  como função do fluxo magnético.

É importante destacar que todas as condutâncias calculadas neste capítulo apresentam um comportamento periódico devido à natureza das nossas aproximações. É por este motivo que os gráficos se limitam a mostrar o comportamento da função em um único período.

Observe-se que no modelo da seção 5.1, ambos vértices são descritos pela mesma matriz de espalhamento, isto faz com que o anel em consideração apresente a simetria de reflexão ilustrada na Fig. 4.11. Esta simetria é a responsável do comportamento ímpar, em campo magnético, apresentado pela condutância de segunda ordem  $G^{(2)}$ , da Fig. 4.10. Para justificar esta afirmação comecemos por notar que uma reflexão do

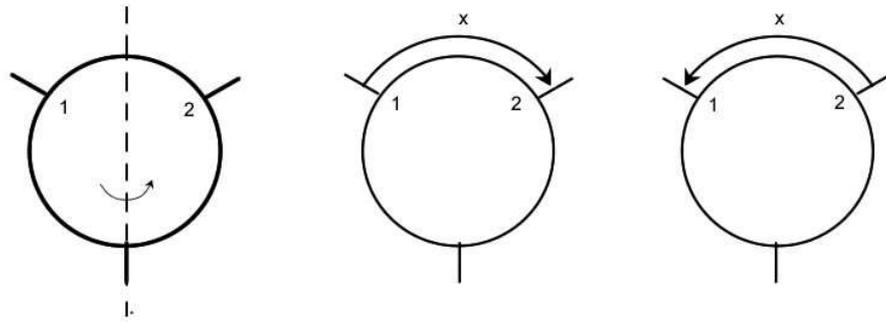


Figura 4.11: Simetria de reflexão e redefinição da variável  $x$ .

anel, junto com uma inversão do campo magnético, nos deixa com o mesmo sistema físico, a não ser pelo intercâmbio dos vértices e de uma nova definição da variável de integração  $x$ , Fig. 4.11. Como resultado, a injetividade 1 com campo magnético  $B$  é igual à injetividade 2 com campo magnético  $-B$ , porém com a variável  $x$  refletida. De forma similar, a emissividade total e a derivada funcional dos coeficientes de transmissão  $A_{\alpha\beta}$  são refletidas ao se inverter o campo magnético. Note que a paridade em campo magnético de  $A_{\alpha\beta}$  faz com que os índices associados aos fios não sejam trocados, como no caso da injetividade. Em resumo, a inversão do campo magnético produz uma reflexão, na variável  $x$ , das quantidades empregadas no cálculo de  $G^{(2)}$ , e no que diz respeito à injetividade um intercâmbio dos vértices. A reflexão da variável  $x$  não tem nenhuma consequência no resultado após a integração. Porém o intercâmbio das injetividades 1 e 2 faz com que a quantidade  $u_1(x) - u_2(x)$  troque de sinal, produzindo desta forma o comportamento ímpar da Fig. 4.10.

O modelo com simetria de reflexão tem a vantagem de produzir uma condutância de terceira ordem  $G^{(3)}$  que apresenta um comportamento par em campo magnético, em concordância com os experimentos. Porém, a simetria ímpar obtida para a condutância de segunda ordem  $G^{(2)}$  não é observada no experimento. Desta forma, o experimento nos sugere uma das seguintes duas opções: a remoção da simetria de reflexão do anel ou a consideração de uma contribuição à condutância não linear de diferente natureza à considerada aqui. Na próxima seção exploraremos a segunda alternativa modificando um dos vértices do anel a fim de eliminar esta simetria, e obter uma condutância de paridade indefinida.

## 4.6 Anel assimétrico.

Para construir um anel sem a simetria de reflexão da Fig. 4.11, precisamos introduzir matrizes de espalhamento diferentes para os vértices. Isto é feito relaxando alguma das condições que nos levaram à matriz (4.3). Considerando que, tanto a condição de realidade, quanto a de simetria da matriz tem como base argumentos físicos; o mais razoável é relaxar a hipótese de simetria por intercâmbio de braços. Um jeito simples de remover esta simetria sem afetar as outras condições, consiste em fazer a seguinte rotação na matriz do vértice:

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \theta & -\sin \theta \\ 0 & \sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a & \epsilon^{1/2} & \epsilon^{1/2} \\ \epsilon^{1/2} & \frac{1}{2}(1-a) & -\frac{1}{2}(1+a) \\ \epsilon^{1/2} & -\frac{1}{2}(1+a) & \frac{1}{2}(1-a) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \theta & \sin \theta \\ 0 & -\sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix} \quad (4.20)$$

Desta forma a matriz do vértice continua sendo real, simétrica, e unitária. Na Fig. 4.12 apresentamos a condutância  $G^{(2)}$  para um anel com os vértices dados pela Eq. (4.20) com  $\theta$  tomando os valores de 0 para o vértice 1 e  $\pi/6$  para o vértice 2.

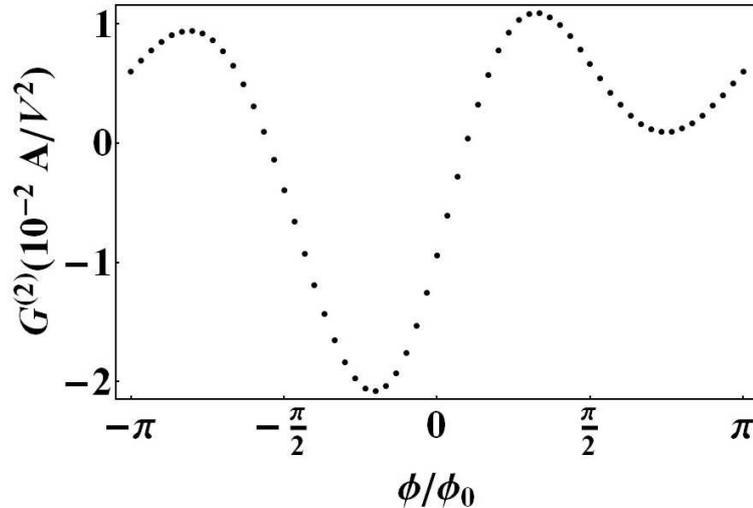


Figura 4.12: Condutância não linear  $G^{(2)}$  como função do fluxo magnético, para um modelo com vértices diferentes.

Como esperávamos a remoção da simetria de reflexão produz uma curva sem paridade definida, similar à curva experimental. Porém, como será visto na seção 4.8, a condutância de terceira ordem para este anel já não é mais par no campo magnético, o que está em desacordo com os resultados experimentais.

Na próxima seção empregaremos o modelo assimétrico para estudar a quebra da rigidez de fase e o comportamento da condutância em função de uma fase adicional, incluída num dos braços.

## 4.7 Rigidez de fase.

À primeira vista é tentador pensar no anel de Aharonov-Bohm como a versão eletrônica de um interferômetro óptico. Porém existem várias diferenças notáveis que enganam a nossa intuição. No anel quântico os elétrons podem dar várias voltas no anel, o que faz com que a condutância apresente contribuições de vários harmônicos (no experimento [12], o comprimento de coerência quântica dos elétrons é tal que, ao menos, os dois primeiros harmônicos tem contribuições consideráveis). Além disso, nos braços do anel quântico elétrons viajam em ambos sentidos, o que produz "localização", enquanto que, num interferômetro óptico os fótons se propagam num sentido só.

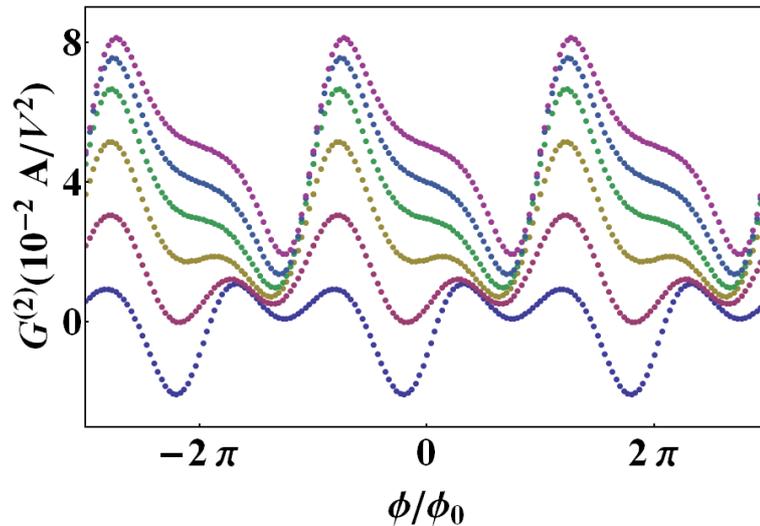


Figura 4.13: Condutância não linear  $G^{(2)}$  do anel assimétrico como função do fluxo magnético para  $\delta k l_2 = 0, 2\pi/15, 4\pi/15, 2\pi/5, 8\pi/15, 2\pi/3$ . As curvas foram deslocadas verticalmente para maior clareza.

É bem conhecido [91, 96] que anéis de Aharonov-Bohm com dois contatos não podem ser usados como interferômetros de elétrons devido às relações de Onsager, que impõem que a condutância linear seja uma função par no campo magnético. Por conta disto, ao introduzirmos um elemento que modifique a fase do elétron ao percorrer um dos braços do anel, o padrão de interferência não se desloca na medida que a fase do elétron, por

exemplo, no braço superior é incrementada. O que acontece é que a paridade imposta pelas relações de Onsager limitam a fase dos harmônicos presentes na condutância a serem 0 ou  $\pi$ . Isto é chamado na literatura por rigidez de fase [96]. A fim de se evitar este inconveniente, os experimentos de interferência costumam empregar anéis com quatro contatos, de forma que as relações de Onsager não estabeleçam paridade na condutância. Neste caso porém, a interpretação dos resultados não é tão simples [82]. Estas considerações são validas para transporte linear. Estudamos aqui o que acontece para a condutância não linear.

Introduzindo um incremento no vetor de onda dos elétrons num dos braços, neste caso no braço 2, simulamos o efeito dos condutores vizinhos no experimento [12]. Note que desta forma estamos acrescentando a fase que ganha o elétron ao percorrer este braço exatamente na quantidade  $\delta k l_i$ . Em contraste, no experimento não é possível saber ao certo a defasagem correspondente com um potencial de porta dado. Na Fig. 4.13 apresentamos as curvas da condutância  $G^{(2)}$  para vários valores de  $\delta k l_2$ .

Na figura 4.13 não é possível identificar o que está acontecendo com as curvas, elas podem estar se deslocando, mas a deformação das mesmas nos impede de observar isto com clareza. Para solucionar este inconveniente, extraímos o primeiro harmônico da condutância  $G^{(2)}$  e o graficamos como função do fluxo magnético  $\phi/\phi_0$  e da fase extra  $\delta$ . O resultado é apresentado na Fig. 4.14.

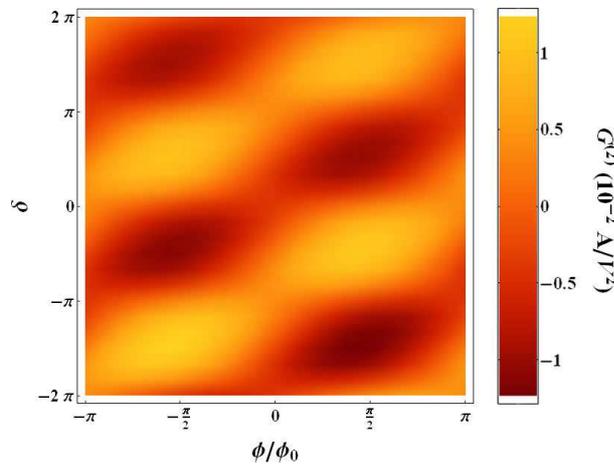


Figura 4.14: Primeiro harmônico da condutância  $G^{(2)}$  em função do fluxo magnético  $\phi/\phi_0$  e da fase extra  $\delta$  introduzida no braço de comprimento  $l_2$ .

Nesta figura o efeito da defasagem introduzida é mais claro, o harmônico parece estar se deslocando linearmente numa direção dada. Um gráfico experimental, similar a este

pode ser encontrado na Ref. [95]. Para sermos mais precisos, usamos a expressão (4.2) para obter a fase deste harmônico como função da fase  $\delta$  introduzida no anel. Isto é apresentado na Fig. 4.15 a para defasagens introduzidos no braço 1 e na Fig. 4.15 b para o braço 2. Note que a Fig. 4.15 b correspondente a situação dos gráficos 4.13 e 4.14.

Na Fig. 4.15 observamos dois comportamentos bem contrastantes. Para defasagens introduzidas no braço 1 o deslocamento causado tem um comportamento altamente não linear, e portanto, completamente inapropriado para se fazer interferometria. Já para o braço 2 o resultado é bem mais alentador, o deslocamento exibe um comportamento monotonicamente crescente com respeito à defasagem introduzida. A Fig. 4.15 mostra que na verdade não existe um comportamento linear entre a fase do primeiro harmônico e a defasagem introduzida. Isto era de se esperar já que ao modificarmos a fase num dos braços não só modificamos a função de onda nele, mas também a distribuição de cargas e por conseguinte o potencial eletrostático resultante.

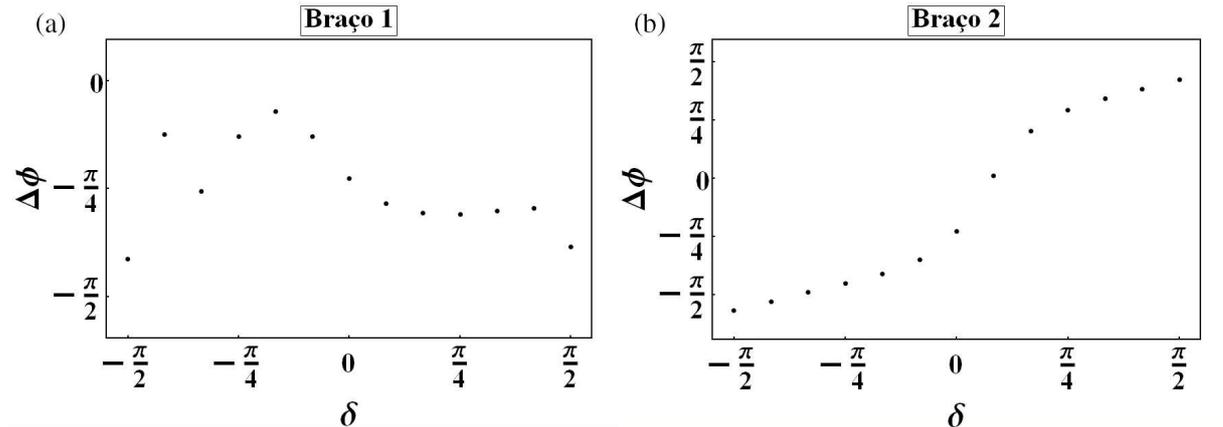


Figura 4.15: Fase do primeiro harmônico da condutância  $G(2)$  como função da fase acrescentada num dos braços do anel.

## 4.8 Potenciais característicos de segunda ordem $u_{\alpha\beta}$ .

Nesta seção calcularemos o potencial característico de segunda ordem, o que nos permitirá fazer algumas observações sobre as propriedades de simetria, da condutância  $G^{(3)}$ , sob inversão do campo magnético.

Começamos escrevendo a equação para a condutância de terceira ordem num anel

com potenciais aplicados de forma simétrica,

$$\begin{aligned}
G^{(3)} = & - \frac{e^3}{h} \int dE \left( -\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) \\
& \times \left\{ \int d\mathbf{r} \int d\mathbf{r}' [(u_1(\mathbf{r}) - u_2(\mathbf{r}))(u_1(\mathbf{r}') - u_2(\mathbf{r}')) + 1/3] \frac{\delta^2(A_{11} - A_{12})}{\delta U(\mathbf{r})\delta U(\mathbf{r}')} \Big|_{\{V_\alpha\}=0} \right. \\
& \left. + \int d\mathbf{r} (u_{11}(\mathbf{r}) + u_{22}(\mathbf{r}) - u_{12}(\mathbf{r}) - u_{21}(\mathbf{r})) \frac{\delta(A_{11} - A_{12})}{\delta U(\mathbf{r})} \Big|_{\{V_\alpha\}=0} \right\}.
\end{aligned} \tag{4.21}$$

Nesta equação os únicos elementos capazes de introduzir um termo ímpar em campo magnético são os relacionados aos potenciais característicos. Desta forma, é conveniente estudar o comportamento da combinação  $(u_{11} + u_{22} - u_{12} - u_{21})(x)$  baixo inversão do campo magnético. Usando a equação de Poisson (3.51) escrevemos

$$\left[ \Delta + 4\pi e^2 \frac{dn}{dE} \right] (u_{11} + u_{22} - u_{12} - u_{21}) = -4\pi e^3 [(u_1 - u_2)^2 + 1] \frac{d^2 n}{dE^2} - 2(u_1 - u_2) \left( \frac{d^2 n_1^i}{dE^2} - \frac{d^2 n_2^i}{dE^2} \right). \tag{4.22}$$

A Fig. 4.16 apresenta os gráficos de  $(u_{11} + u_{22} - u_{12} - u_{21})(x)$  para um anel simétrico com valores do fluxo magnético de  $\phi/\phi_0 = \pm\pi/4$ .

Observemos que a inversão do campo magnético causa unicamente uma reflexão na variável  $x$ . Em conseqüência, a condutância de terceira ordem deve apresentar um comportamento simétrico no fluxo magnético, já que a inversão do campo magnético causa uma reflexão das quantidades envolvidas na Eq. (4.21) e tal reflexão é irrelevante dada a integral na variável de posição. Para o termo que apresenta  $(u_1 - u_2)(u_1 - u_2)$  também vale o mesmo argumento, já que os câmbios de sinal cancelam-se e resta unicamente a reflexão destas quantidades. Desta forma mostra-se que um anel simétrico produz uma condutância  $G^{(3)}$  par em campo magnético.

Por último, gostaríamos de destacar que para anéis sem simetria de reflexão u alguma outra propriedade específica não há nenhuma razão pela qual a condutância  $G^{(3)}$  deva ser simétrica.

## 4.9 Discussão dos resultados.

No que diz respeito à interferometria não linear os resultados aqui apresentados não são muito alentadores. Para se fazer interferometria é preciso calibrar um anel de forma que a defasagem observada na condutância do mesmo corresponda de forma unívoca com a defasagem introduzido no anel. Embora a Fig. 4.15 b tenha mostrado que é

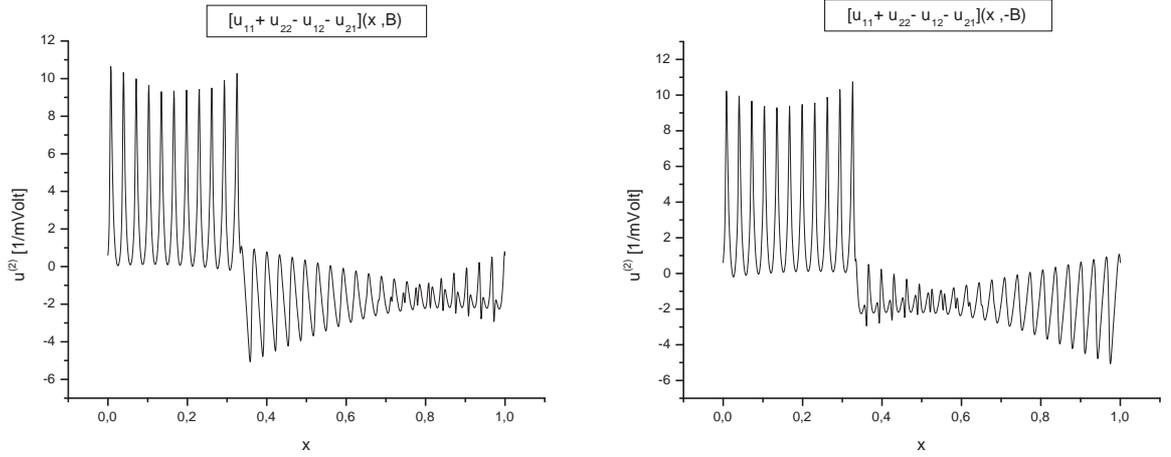


Figura 4.16: Potencial característico de segunda ordem como função da posição adimensional ( $x$ ). A esquerda o campo magnético corresponde com uma fase de AB  $\phi = \pi/4$  e a direita de  $\phi = -\pi/4$ .

possível encontrar uma configuração do anel para a qual a relação entre as defasagens é unívoca, este não é o caso mais comum. Além disso, a não linearidade do problema faz com que a introdução de algum elemento extra no anel, como por exemplo um ponto quântico, resulte numa situação bem diferente a simplesmente acrescentar uma fase. Para dar conta disto basta estimar o impacto de um ponto quântico, introduzido num braço do anel, sobre os potenciais característicos. Ademais existem outros problemas que temos evitado nas nossas considerações. Por exemplo, a temperatura no experimento [12] corresponde a uma média sobre uma variação no vetor de onda longitudinal dos elétrons,  $k_L$ , que introduz modificações consideráveis tanto no potencial característico quanto na transmissão. Isto é, a sensibilidade do interferômetro faz com que a temperatura registrada não possa ser desprezada. Outro problema, seria considerar vários canais. Embora o nosso modelo permita superpor os canais trivialmente, a situação real, um ponto quântico num dos braços do anel, é bem mais complexa. Em especial considerando que os diferentes canais tem acoplamentos particulares com os estados do ponto quântico.

Sobre a simetria dos diferentes coeficientes da condutância, encontramos que não existe razão, a não ser que o anel apresente uma simetria de reflexão, para que os coeficientes  $G^{(3,5)}$  sejam pares sob inversão do campo magnético. Considerando que o anel foi fabricado com o máximo de simetria possível (permitida pelas limitações experimentais) e que os contatos se encontram no regime aberto, é razoável supor um

alto grau de simetria de reflexão no dispositivo. Isto nos remete à ausência de simetria, observada experimentalmente, dos coeficientes  $G^{(2,4)}$ , a qual não é consistente com o observado no nosso modelo. Segundo nosso modelo tais coeficientes deveriam apresentar, para um anel simétrico, um comportamento ímpar em campo magnético. Uma possível solução a este problema seria supor que a componente ímpar da condutância não linear calculada aqui se adiciona com uma componente par em campo magnético proveniente de algum outro tipo de processo não linear, não elástico não incluído no modelo. Por enquanto isto é uma simples especulação.

Outra questão é por que as oscilações de período  $h/2e$  não se manifestam nos coeficientes  $G^{(2)}$  e  $G^{(4)}$ . Uma possível explicação tem a ver com o cenário de um anel simétrico. Estas oscilações estão relacionadas com processos que apresentam duas voltas nas trajetórias dos elétrons que interferem. Dado que para dois contatos, reflexão e transmissão estão relacionados de forma linear, basta considerar unicamente os processos de reflexão. Existem dois tipos de processos a serem considerados: processos de interferência entre duas trajetórias cada uma com uma volta em torno do anel e processos com duas voltas numa trajetória e nenhuma na outra. Os processos com duas voltas numa mesma trajetória tem uma amplitude menor devido à descoerência, e para o comprimento de descoerência estimado no experimento [12] resultam desprezíveis. Já a interferência de trajetórias com uma volta cada, produz oscilações de amplitude considerável, conhecidas na literatura por Altshuler-Aronov-Spivak [97]. É importante notar que as oscilações AAS são independentes da fase acumulada no anel e tem um comportamento par no campo magnético. Desta forma as oscilações AAS não contribuem aos coeficientes  $G^{(2)}$  e  $G^{(4)}$  de um anel simétrico. Por último gostaríamos de chamar a atenção para o fato de que o valor do campo magnético para o qual as oscilações de período  $h/2e$  desaparecem ( $\approx 0.3$  T) correspondem com o campo magnético no qual o raio de ciclotron é da ordem do raio do anel, o que destrói as oscilações de AAS.

# Capítulo 5

## Bombeamento quântico de elétrons.

Neste capítulo descreveremos uma forma de tratar o problema de bombeamento de elétrons em pontos quânticos, empregando funções de Green e levando em consideração a interação eletrônica. Em particular estaremos interessados no regime de bloqueio de Coulomb.

Considerando que este capítulo apresenta uma quantidade considerável de cálculo explícito, o que pode dificultar a compreensão dos resultados, achamos pertinente apresentar um esboço da estratégia de cálculo.

O capítulo começa com a definição do modelo usado para descrever a dinâmica do ponto quântico com interação e dependência temporal, seção 2.1. A seguir, definiremos a corrente em termos das funções de Green de contato, seção 5.2.1, e usando o formalismo das equações de movimento expressaremos esta corrente em termos da função de Green do ponto quântico, seção 5.2.2.

Para o cálculo da função de Green do ponto quântico usaremos de novo o formalismo das equações de movimento, seção 5.3. Neste ponto, constatamos que as equações de movimento não fecham, ou seja, o cálculo das funções de Green do ponto quântico requer funções de correlação de 4 operadores. O cálculo destas funções de correlação requer por sua vez mais funções de correlação, neste caso envolvendo 6 operadores. O aumento indefinido de funções de correlação, cada vez envolvendo mais operadores, é consequência do termo de interação no hamiltoniano e é a manifestação da física de muitos corpos presente no nosso problema.

A fim de lidar com as dificuldades descritas anteriormente, é preciso introduzir algum tipo de aproximação. Na seção 5.3.1 se descreve a aproximação de Hartree com a qual as equações de movimento para a função de Green do ponto quântico são fechadas, seção

## 5.3.2.

Até aqui, temos lidado com a física de muitos corpos presente no nosso problema. O seguinte passo, está relacionado às dificuldades inerentes à variação temporal do hamiltoniano (5.4). A fim de simplificar estas dificuldades, restringiremos o nosso estudo ao regime adiabático descrito na seção 5.4. Neste regime a dinâmica do ponto quântico tem duas escalas de tempo bem diferenciadas: uma escala de tempo relacionada à vida média do estado ressonante (escala de tempo rápida), e outra escala de tempo correspondente à frequência de bombeamento (escala de tempo lenta). Para evidenciar a separação entre estas duas escalas de tempo nas nossas equações, introduziremos a re-parametrização descrita na seção 5.4.1.

Observemos que o cálculo das funções de Green do ponto quântico da seção 5.4 requer dos valores médios das ocupações  $\langle n_s^{(0)}(\bar{t}) \rangle$  e  $\langle n_s^{(1)}(\bar{t}) \rangle$ . As seções 5.4.2 e 5.4.3 mostram como tais valores podem ser calculados em termos das próprias funções de Green do ponto quântico, produzindo desta forma um problema auto-consistente. Desta forma os valores médios da ocupação do ponto quântico são calculados iterativamente até se alcançar um valor constante. Em seguida a função de Green é calculada tomando em consideração o valor obtido no processo iterativo.

Para concluir o cálculo da corrente de bombeamento, na seção 5.4.4 introduzimos a re-parametrização da seção 5.4.1 na equação da corrente (5.21).

A fim de testar os nossos resultados, calculamos o limite para o caso sem interação, o qual será comparado com os resultados obtidos na Ref. ... usando outros métodos. Esta comparação será discutida no apêndice A.

## 5.1 Modelo

Consideremos um ponto quântico com uma única ressonância, no regime do bloqueio de Coulomb, com o potencial no ponto quântico sendo controlado por meio de um acoplamento capacitivo entre o ponto quântico e uma região condutora disposta para tal fim ( $V_3(t)$  na Fig. 5.1). O hamiltoniano do sistema se lê

$$H_{\text{ponto}} = \sum_{s=\uparrow,\downarrow} \varepsilon_s(t) d_s^\dagger d_s + U n_\uparrow n_\downarrow, \quad (5.1)$$

onde  $n_s = d_s^\dagger d_s$  é o operador de número e  $d_s^\dagger$  ( $d_s$ ) é o operador de criação (aniquilação) de elétrons no ponto quântico, com energia  $\varepsilon_s(t) = \varepsilon_{0s} - \eta e V_3(t)$  e spin  $s$ . Aqui  $e > 0$  denota a carga do elétron e  $\eta$  é a constante que descreve a magnitude do acoplamento

capacitivo. O ponto quântico se encontra em contato com dois reservatórios, a saber  $L$  e  $R$ , por meio de dois fios quânticos cada um com um único canal aberto. Assumindo que os elétrons nos fios não interagem, podemos escrever o hamiltoniano dos elétrons nos fios como

$$H_{\text{fios}} = \sum_k \sum_{\alpha=L,R} \sum_{s=\uparrow,\downarrow} \varepsilon_{k\alpha s} c_{k\alpha s}^\dagger c_{k\alpha s}, \quad (5.2)$$

onde  $c_{k\alpha s}^\dagger$  ( $c_{k\alpha s}$ ) são os operadores de criação (aniquilação) de elétrons com momento  $k$  e spin  $s$  no fio  $\alpha$ . O ponto quântico é separado dos fios por barreiras de tunelamento controladas independentemente por meio das voltagens  $V_1(t)$  e  $V_2(t)$ , segundo se mostra na Fig. 5.1. Então, o hamiltoniano de acoplamento é

$$H_{\text{fios-ponto}} = \sum_{k,\alpha,s} \left[ V_{k\alpha}(t) c_{k\alpha s}^\dagger d_s + \text{H.c.} \right]. \quad (5.3)$$

Os elementos da matriz de tunelamento  $V_{k\alpha}$  conectam os estados nos fios com o estado ressonante do ponto quântico, e aqui vamos supor que sejam independentes de spin. Porém, é importante notar que eles apresentam uma dependência temporal.

Finalmente, o hamiltoniano total do nosso modelo é a soma das três contribuições descritas anteriormente,

$$\mathcal{H} = H_{\text{fios}} + H_{\text{ponto}} + H_{\text{fios-ponto}}. \quad (5.4)$$

## 5.2 Corrente num ponto quântico com interação e dependência temporal.

O hamiltoniano  $H_{\text{fios-ponto}}$  gera um acoplamento entre os elétrons nos fios com os do ponto quântico. Isto, combinado com o termo de energia de carga do ponto quântico, faz com que a evolução temporal do sistema se torne um problema não trivial de muitos corpos. Em conseqüência não é mais possível calcular os coeficientes da condutância em termos de elementos de matrizes de espalhamento de partículas independentes. Desta forma, a descrição usual das correntes de bombeamento, em termos de matrizes de espalhamento, não é mais válida. A seguir, apresentaremos uma formulação que nos permite superar estas limitações.

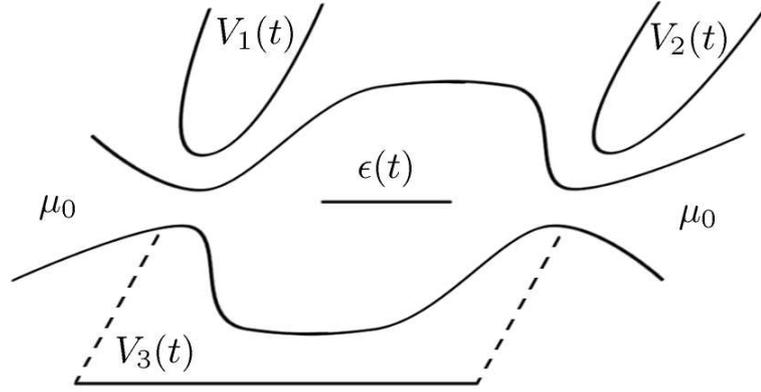


Figura 5.1: Representação esquemática do bombeamento de elétrons em um ponto quântico com uma única ressonância. As voltagens  $V_1(t)$  e  $V_2(t)$  produzem a variação temporal dos acoplamentos entre a ressonância da região central e os estados nos fios. Enquanto que o potencial  $V_3(t)$  introduz uma variação do nível da ressonância. Note-se que ambos reservatórios possuem um mesmo potencial químico  $\mu_0$ .

### 5.2.1 Definição da corrente.

Antes de escrever a expressão para a corrente, é importante sinalizar que neste capítulo estamos interessados em calcular a corrente de bombeamento estacionária, ou seja, não estamos interessados no regime transiente. Sendo assim, podemos calcular a corrente de bombeamento da mesma maneira que no capítulo 2, desta forma escrevemos

$$J_\alpha(t) = -e \sum_s \left\langle \frac{d}{dt} \mathcal{N}_{\alpha s}(t) \right\rangle_\alpha, \quad (5.5)$$

onde os brackets representam a média térmica e o operador de número de elétrons é dado por

$$\mathcal{N}_{\alpha s}(t) = \sum_k c_{k\alpha s}^\dagger(t) c_{k\alpha s}(t). \quad (5.6)$$

Note-se que definimos a corrente como positiva quando flui do ponto quântico aos fios. Usando a equação de Heisenberg para calcular a derivada temporal de  $\mathcal{N}_{\alpha s}(t)$  obtemos

$$J_\alpha(t) = \frac{ie}{\hbar} \sum_{k,\alpha,s} \left[ V_{k\alpha}(t) \left\langle c_{k\alpha s}^\dagger(t) d_s(t) \right\rangle - c.c. \right], \quad (5.7)$$

o que se pode escrever em termos das funções de Green [64, ?, 61]

$$\begin{aligned} G_{s,k\alpha s}^<(t, t') &\equiv \frac{i}{\hbar} \langle c_{k\alpha s}^\dagger(t') d_s(t) \rangle & \text{e} \\ G_{k\alpha s, s}^<(t, t') &\equiv \frac{i}{\hbar} \langle d_s^\dagger(t') c_{k\alpha s}(t) \rangle \end{aligned} \quad (5.8)$$

como

$$J_\alpha(t) = 2e \operatorname{Re} \left\{ \sum_{k,s} V_{k\alpha}(t) G_{s,k\alpha s}^<(t, t) \right\}. \quad (5.9)$$

Aqui usamos a relação  $G_{s,k\alpha s}^<(t, t) = -[G_{k\alpha s, s}^<(t, t)]^*$ .

### 5.2.2 Expressão da corrente em termos da função de Green do ponto quântico.

Nesta subsecção, usaremos o método das equações de movimento, junto com as regras de Langreth, para obter uma expressão da corrente em termos unicamente da função de Green do ponto quântico.

O primeiro passo consiste em escrever e solucionar as equações de movimento das funções de Green ordenadas temporalmente. Sendo assim, escrevemos

$$G_{s,k\alpha s}^t(t, t') \equiv -\frac{i}{\hbar} \langle \mathcal{T} [d_s(t) c_{k\alpha s}^\dagger(t')] \rangle. \quad (5.10)$$

onde  $\mathcal{T}$  é o operador de ordenamento temporal. Derivando  $G_{s,k\alpha s}^t(t, t')$  com respeito a  $t'$  e usando a equação de Heisenberg para calcular  $\partial_{t'} c_{k\alpha s}^\dagger(t')$ , obtemos a equação diferencial

$$\left( -i\hbar \frac{\partial}{\partial t'} - \varepsilon_{k\alpha s} \right) G_{s,k\alpha s}^t(t, t') = V_{k\alpha}^*(t') G_{ss}^t(t, t'), \quad (5.11)$$

com

$$G_{ss}^t(t, t') \equiv -\frac{i}{\hbar} \langle \mathcal{T} [d_s(t) d_s^\dagger(t')] \rangle. \quad (5.12)$$

Em seguida, usando a equação da função de Green dos elétrons nos fios isolados, a saber

$$\left( -i\hbar \frac{\partial}{\partial t'} - \varepsilon_{k\alpha s} \right) g_{k\alpha s}^t(t, t') = \delta(t - t'), \quad (5.13)$$

reescrevemos a Eq. (5.11) da seguinte forma

$$G_{s,k\alpha s}^t(t, t') = \int_{-\infty}^{+\infty} dt_1 G_{ss}^t(t, t_1) V_{k\alpha}^*(t_1) g_{k\alpha s}^t(t_1, t'). \quad (5.14)$$

O passo seguinte consiste em realizar a extensão analítica desta equação para posteriormente empregar as regras de Langreth, assim

$$G_{s,k\alpha s}(\tau, \tau') = \int_{\mathcal{C}} d\tau_1 G_{ss}(\tau, \tau_1) V_{k\alpha}^*(\tau_1) g_{k\alpha s}(\tau_1, \tau'). \quad (5.15)$$

Realizando um cálculo análogo ao descrito anteriormente escrevemos

$$G_{k\alpha s,s}(\tau, \tau') = \int_{\mathcal{C}} d\tau_1 g_{k\alpha s}(\tau, \tau_1) V_{k\alpha}(\tau_1) G_{ss}(\tau_1, \tau'), \quad (5.16)$$

com a integração destas equações sendo realizada no contorno de Keldish  $\mathcal{C}$ , ilustrado na Fig. 2.2. Note que como  $H_{\text{fios}}$  é independente do tempo, a função de Green dos fios é invariante por translações temporais, ou seja  $g_{k\alpha s}(\tau, \tau') = g_{k\alpha s}(\tau - \tau')$ . Finalmente, o teorema de Langreth [63] nos permite calcular  $G^<$  a partir da Eq. (5.15) e o resultado é

$$G_{s,k\alpha s}^<(t, t') = \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \left[ G_{ss}^r(t, t_1) V_{k\alpha}^*(t_1) g_{k\alpha s}^<(t_1, t') + G_{ss}^<(t, t_1) V_{k\alpha}^*(t_1) g_{k\alpha s}^a(t_1, t') \right]. \quad (5.17)$$

As funções de Green dos fios isolados são [61]

$$g_{k\alpha s}^a(t, t') = \frac{i}{\hbar} \theta(t' - t) e^{-i\varepsilon_{k\alpha s}(t-t')/\hbar}, \quad (5.18)$$

$$g_{k\alpha s}^r(t, t') = -\frac{i}{\hbar} \theta(t - t') e^{-i\varepsilon_{k\alpha s}(t-t')/\hbar} \quad (5.19)$$

e

$$g_{k\alpha s}^<(t, t') = \frac{i}{\hbar} f_{\alpha}(\varepsilon_{k\alpha s}) e^{-i\varepsilon_{k\alpha s}(t-t')/\hbar}, \quad (5.20)$$

sendo que  $f_{\alpha}(E) = [e^{\beta(E-\mu_{\alpha})} + 1]^{-1}$  é a função de Fermi do fio  $\alpha$ . Introduzindo as Eqs. (5.18) e (5.20) na Eq. (5.17) e o resultado disto na Eq. (5.9), chegamos à expressão

$$J_{\alpha}(t) = -\frac{2e}{\hbar} \text{Im} \left\{ \sum_{k,s} \int_{-\infty}^{\infty} dt' V_{k\alpha}^*(t') V_{k\alpha}(t) e^{i\varepsilon_{k\alpha s}(t-t')/\hbar} \left[ f_{\alpha}(\varepsilon_{k\alpha s}) G_{ss}^r(t, t') + G_{ss}^<(t, t') \theta(t' - t) \right] \right\}. \quad (5.21)$$

Agora, só resta calcular a função de Green do ponto quântico  $G_{ss}(t, t')$ , mas é aqui onde a física de muitos corpos se apresentara.

### 5.3 Determinando a função de Green do ponto quântico

A expressão para a corrente derivada na Sec. 5.2 requer as funções de Green do ponto quântico  $G_{ss}^<$  e  $G_{ss}^r$ . A fim de calculá-las, começaremos escrevendo as equações de movimento da função de Green ordenada temporalmente  $G_{ss}^t$ , como definida na Eq. (5.12):

$$\left[ i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - \varepsilon_s(t) \right] G_{ss}^t(t, t') = \delta(t - t') + U G_{ss,s}^{(2)}(t, t') + \sum_{k,\alpha} V_{k\alpha}^*(t) G_{k\alpha s,s}^t(t, t'), \quad (5.22)$$

onde introduzimos a função de correlação

$$G_{s\bar{s},s}^{(2)}(t, t') \equiv -\frac{i}{\hbar} \langle \mathcal{T} [d_s(t) n_{\bar{s}}(t) d_s^\dagger(t')] \rangle \quad (5.23)$$

que envolve quatro operadores fermiônicos. A aparição da nova função de correlação  $G^{(2)}$  foi causada pelo termo de interação  $Un_\downarrow n_\uparrow$ . Da mesma forma, este termo também gerará funções de correção de ordens superiores na equação de movimento para  $G^{(2)}$ , a saber

$$\begin{aligned} \left[ i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - \varepsilon_s(t) - U \right] G_{s\bar{s},s}^{(2)}(t, t') &= \delta(t - t') \langle n_{\bar{s}}(t) \rangle \\ &+ \sum_{k\alpha} \left[ V_{k\alpha}^* \Gamma_{1;k\alpha s}^{(2)}(t, t') - V_{k\alpha} \Gamma_{2;k\alpha s}^{(2)}(t, t') - V_{k\alpha}^* \Gamma_{3;k\alpha s}^{(2)}(t, t') \right]. \end{aligned} \quad (5.24)$$

Aqui

$$\langle n_s(t) \rangle = \langle d_s(t) d_s^\dagger(t) \rangle \equiv i\hbar G_{ss}^<(t, t) \quad (5.25)$$

e as três funções de correlação fio-ponto são dadas por [61]:

$$\begin{aligned} \Gamma_{1;k\alpha s}^{(2)}(t, t') &\equiv -\frac{i}{\hbar} \langle \mathcal{T} [c_{k\alpha s}(t) n_{\bar{s}}(t) d_s^\dagger(t')] \rangle \\ \Gamma_{2;k\alpha s}^{(2)}(t, t') &\equiv -\frac{i}{\hbar} \langle \mathcal{T} [c_{k\alpha \bar{s}}^\dagger(t) d_{\bar{s}}(t) d_s(t) d_s^\dagger(t')] \rangle, \\ \Gamma_{3;k\alpha s}^{(2)}(t, t') &\equiv -\frac{i}{\hbar} \langle \mathcal{T} [c_{k\alpha \bar{s}}(t) d_{\bar{s}}^\dagger(t) d_s(t) d_s^\dagger(t')] \rangle. \end{aligned} \quad (5.26)$$

A proliferação de funções de correlação, cada vez com um maior número de operadores envolvidos, segue indefinidamente, impossibilitando qualquer tentativa de cálculo analítico exato. Desta forma é necessário introduzir algum tipo de aproximação controlável que permita fechar a álgebra.

### 5.3.1 Aproximação de campo médio.

Centrando a nossa atenção no regime de bloqueio coulombiano e assumindo que a temperatura de Kondo é muito baixa,  $T_K \ll T$ , define-se um cenário onde a aproximação de campo médio funciona bem. Na aproximação de campo médio as funções de correlação das Eqs. (5.26) se reduzem a

$$\Gamma_{1;k\alpha s}^{(2)\text{mf}} = \langle n_{\bar{s}} \rangle G_{k\alpha s, s} \quad \text{e} \quad \Gamma_{2;k\alpha s}^{(2)\text{mf}} = \Gamma_{3;k\alpha s}^{(2)\text{mf}} = 0, \quad (5.27)$$

com o qual, a Eq. (5.24) se escreve

$$\left[ i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - \varepsilon_s(t) - U \right] G_{s\bar{s},s}^{(2)\text{mf}}(t, t') = \langle n_{\bar{s}}(t) \rangle \left[ \delta(t - t') + \sum_{k\alpha} V_{k\alpha}^*(t) G_{k\alpha s, s}^t(t, t') \right]. \quad (5.28)$$

Aqui o número de ocupação  $\langle n_{\bar{s}}(t) \rangle$  tem de ser determinado auto-consistentemente para cada instante de tempo  $t$ . É importante notar que a Eq. (5.28) se refere à função de Green  $G_{s\bar{s},s}^{(2)}$  ordenada temporalmente. Temos portanto que solucionar um sistema formado por três equações de movimento, Eqs. (5.11), (5.22) e (5.28), e três funções desconhecidas,  $G_{k\alpha s}^t$ ,  $G_{ss}^t$  e  $G_{s\bar{s},s}^{(2)}$ . Posteriormente, fazendo a continuação analítica obteremos as funções,  $G_{ss}^r$  e  $G_{ss}^<$ , necessárias para o cálculo da corrente bombeada dada pela Eq. (5.21).

### 5.3.2 Solução formal das equações de movimento

Para começar, definamos as duas funções de Green auxiliares  $g_s$  e  $g_s^U$  que satisfazem as equações de movimento

$$\left[ i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - \varepsilon_s(t) \right] g_s(t, t') = \delta(t - t') \quad (5.29)$$

e

$$\left[ i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - \varepsilon_s(t) - U \right] g_s^U(t, t') = \delta(t - t'), \quad (5.30)$$

respectivamente. Escrevendo a continuação analítica da Eq. (5.28) em termos das funções introduzidas acima, se obtém

$$G_{s\bar{s},s}^{(2)\text{mf}}(\tau, \tau') = g_s^U(\tau, \tau') \langle n_{\bar{s}}(\tau') \rangle + \sum_{k,\alpha} \int d\tau_1 g_s^U(\tau, \tau_1) \langle n_{\bar{s}}(\tau_1) \rangle V_{k\alpha}^*(\tau_1) G_{k\alpha s}(\tau_1, \tau'). \quad (5.31)$$

Em seguida, usando a Eq. (5.16), escrevemos

$$G_{s\bar{s},s}^{(2)\text{mf}}(\tau, \tau') = g_s^U(\tau, \tau') \langle n_{\bar{s}}(\tau') \rangle + \int d\tau_2 F_{ss}(\tau, \tau_2) G_{ss}(\tau_2, \tau'), \quad (5.32)$$

onde foi introduzida a função

$$F_{ss}(\tau, \tau') = \sum_{k,\alpha} \int d\tau_1 g_s^U(\tau, \tau_1) \langle n_{\bar{s}}(\tau_1) \rangle V_{k\alpha}^*(\tau_1) g_{k\alpha s}(\tau_1 - \tau') V_{k\alpha}(\tau'). \quad (5.33)$$

Neste ponto, estamos prontos para escrever a equação integral para  $G_{ss}(\tau, \tau')$ . Usando o resolvente da Eq. (5.29) para reescrever a Eq. (5.22) como uma equação integral, efetuando a continuação analítica no plano complexo, e usando as Eqs. (5.16) e (5.32), encontramos que

$$\begin{aligned} G_{ss}(\tau, \tau') = g_s(\tau, \tau') &+ U \langle n_{\bar{s}}(\tau') \rangle \int d\tau_1 g_s(\tau, \tau_1) g_s^U(\tau_1, \tau') \\ &+ \int d\tau_1 \int d\tau_2 g_s(\tau, \tau_1) \tilde{\Sigma}_{ss}(\tau_1, \tau_2) G_{ss}(\tau_2, \tau'), \end{aligned} \quad (5.34)$$

onde

$$\begin{aligned}\tilde{\Sigma}_{ss}(\tau, \tau') &= U F_{ss}(\tau, \tau') + \sum_{k, \alpha} V_{k\alpha}^*(\tau) g_{k\alpha s}(\tau - \tau') V_{k\alpha}(\tau') \\ &= \sum_{k, \alpha} \int d\tau_1 [U g_s^U(\tau, \tau_1) \langle n_{\bar{s}}(\tau_1) \rangle + \delta(\tau - \tau_1)] V_{k\alpha}^*(\tau_1) g_{k\alpha s}(\tau_1 - \tau') V_{k\alpha}(\tau').\end{aligned}\quad (5.35)$$

Podemos simplificar a equação para  $G_{ss}$  introduzindo o resolvente

$$\bar{g}_s(\tau, \tau') \equiv g_s(\tau, \tau') + U \langle n_{\bar{s}}(\tau') \rangle \int d\tau_1 g_s(\tau, \tau_1) g_s^U(\tau_1, \tau'). \quad (5.36)$$

Como resultado, obtemos

$$G_{ss}(\tau, \tau') = \bar{g}_s(\tau, \tau') + \int d\tau_1 \int d\tau_2 \bar{g}_s(\tau, \tau_1) \Sigma_s(\tau_1, \tau_2) G_{ss}(\tau_2, \tau'), \quad (5.37)$$

com a auto-energia de campo médio definida por

$$\Sigma_s(\tau, \tau') = \sum_{k\alpha} V_{k\alpha}^*(\tau) g_{k\alpha s}(\tau - \tau') V_{k\alpha}(\tau'). \quad (5.38)$$

É interessante notar que a auto-energia pode ser calculada independentemente dos estados do ponto quântico.

Antes de concluir esta seção, gostaríamos de sinalizar que as Eqs. (5.36) e (5.37) indicam que para o cálculo de  $G_{ss}(\tau, \tau')$  é preciso conhecer  $\langle n_{\bar{s}}(\tau) \rangle$ . Por sua vez, o valor esperado  $\langle n_{\bar{s}}(\tau) \rangle$  é calculado por meio da função de Green  $G_{ss}(\tau, \tau')$ . Portanto, o conjunto de equações (5.25), (5.36) e (5.37) formam um problema auto-consistente.

## 5.4 Regime Adiabático

O bombeamento de cargas em pontos quânticos apresenta duas escalas de tempo bem diferenciadas: O tempo médio  $\tau_D$  que um elétron permanece dentro do ponto quântico (vida média do estado ressonante) e o inverso da frequência de bombeamento,  $\tau_{\text{pump}} = 1/\omega_{\text{pump}}$ .

Os experimentos de bombeamento em pontos quânticos são tipicamente realizados com frequências entre 10 MHz e 1 GHz. Por exemplo, para  $\omega_{\text{pump}} = 100$  MHz se tem um  $\tau_{\text{pump}} \sim 10$  ns. Já o tempo médio de permanência no ponto quântico é dado pelo inverso da largura da ressonância  $\Gamma$ . Para estimar esta largura, lembremos primeiro que o espaçamento médio de níveis  $\Delta = 2\pi\hbar^2/(\mathcal{A}m^*)$ , sendo  $\mathcal{A}$  a área efetiva do ponto quântico e  $m^* = 0.067m_e$  (para o AlGaAs). Desta forma  $\hbar^2/m^* = 121 \text{ eV\AA}^2$  e por conseguinte

$\Delta \approx 7.6\mu\text{eV}/\mathcal{A}$ , com  $\mathcal{A}$  medido em microns quadrados. Finalmente, no regime de bloqueio de Coulomb  $\Gamma = (0.01 - 0.1)\Delta$ , e conseqüentemente  $\tau_D = \hbar/\Gamma \approx (0.8 - 8)$  ns/ $\mathcal{A}$ .

Para  $\Gamma \approx 0.01\Delta$ , e  $\mathcal{A} \approx 1 \mu\text{m}^2$ , temos que  $\tau_{\text{pump}} \gg \tau_D$ . Sendo assim, na medida que os potenciais de bombeamento são variados, o sistema evolui de uma situação estacionária a outra. No caso de bombeamento "puro", isto é, com todos os reservatórios em equilíbrio térmico à mesma temperatura e potencial químico, o sistema evolui entre situações de equilíbrio. Isto é o que se conhece como *aproximação adiabática*.

Na proxima subseção expressaremos todas as funções de Green envolvidas nas Eqs. (5.36) e (5.37) na aproximação adiabática.

### 5.4.1 Reparametrização das funções de Green

Com a finalidade de separar as escalas de tempo descritas anteriormente, introduzimos a seguinte re-parametrização

$$G(t, t') \rightarrow G\left(t - t', \frac{t + t'}{2}\right), \quad (5.39)$$

desta forma, as variáveis temporais são substituídas por uma diferença de tempos  $\delta t = t - t'$  (escala de tempo rápida) e o tempo médio  $\bar{t} = (t + t')/2$  (escala de tempo lenta).

Reescrevendo a Eq. (5.36) em termos dos novos parâmetros, obtemos

$$\bar{g}_s(t - t', \bar{t}) = g_s(t - t', \bar{t}) + U \langle n_{\bar{s}}(t') \rangle \int dt_1 g_s\left(t - t_1, \frac{t + t_1}{2}\right) g_s^U\left(t_1 - t', \frac{t_1 + t'}{2}\right). \quad (5.40)$$

A seguir, expandimos as funções de Green até a ordem linear nas variáveis associadas com a escala de tempo lenta,

$$\begin{aligned} \bar{g}_s(t - t', \bar{t}) &= g_s(t - t', \bar{t}) & (5.41) \\ &+ U \left[ \langle n_{\bar{s}}(\bar{t}) \rangle - \frac{\delta t}{2} \frac{\partial \langle n_{\bar{s}}(\bar{t}) \rangle}{\partial \bar{t}} \right] \int dt_1 \left[ g_s(t - t_1, \bar{t}) + \left( \frac{t_1 - t'}{2} \right) \frac{\partial g_s}{\partial \bar{t}}(t - t_1, \bar{t}) \right] \\ &\times \left[ g_s^U(t_1 - t', \bar{t}) + \left( \frac{t_1 - t'}{2} \right) \frac{\partial g_s^U}{\partial \bar{t}}(t_1 - t', \bar{t}) \right], \end{aligned}$$

e realizamos uma transformada de Fourier com respeito às variáveis rápidas, desprezando

os termos de segunda ordem. Desta forma chegamos a

$$\begin{aligned} \bar{g}_s(\omega, \bar{t}) &= g_s(\omega, \bar{t}) + \frac{i\hbar}{2} U \frac{\partial \langle n_{\bar{s}}(\bar{t}) \rangle}{\partial \bar{t}} \frac{\partial}{\partial \omega} \left[ g_s(\omega, \bar{t}) g_s^U(\omega, \bar{t}) \right] \\ &+ U \langle n_{\bar{s}}(\bar{t}) \rangle \left[ g_s(\omega, \bar{t}) g_s^U(\omega, \bar{t}) - \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial g_s}{\partial \bar{t}}(\omega, \bar{t}) \frac{\partial g_s^U}{\partial \omega}(\omega, \bar{t}) \right. \\ &\left. + \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial g_s}{\partial \omega}(\omega, \bar{t}) \frac{\partial g_s^U}{\partial \bar{t}}(\omega, \bar{t}) \right]. \end{aligned} \quad (5.42)$$

Note que a variável  $\omega$  foi definida com dimensões de energia e não de frequência. Em continuação, expandimos formalmente as funções de Green e as ocupações até a ordem linear, isto é,

$$\bar{g}_s(\omega, \bar{t}) = \bar{g}_s^{(0)}(\omega, \bar{t}) + \bar{g}_s^{(1)}(\omega, \bar{t}), \quad (5.43)$$

$$\langle n_{\bar{s}}(\bar{t}) \rangle = \langle n_{\bar{s}}^{(0)}(\bar{t}) \rangle + \langle n_{\bar{s}}^{(1)}(\bar{t}) \rangle, \quad (5.44)$$

$$\bar{g}_s^{(0)}(\omega, \bar{t}) = g_s^{(0)}(\omega, \bar{t}) + U \langle n_{\bar{s}}^{(0)}(\bar{t}) \rangle g_s^{(0)}(\omega, \bar{t}) g_s^{U(0)}(\omega, \bar{t}) \quad (5.45)$$

e (omitindo a dependência em  $\omega$  e  $\bar{t}$ )

$$\begin{aligned} \bar{g}_s^{(1)} &= g_s^{(1)} + U \left[ \langle n_{\bar{s}}^{(1)}(\bar{t}) \rangle g_s^{(0)} g_s^{U(0)} + \langle n_{\bar{s}}^{(0)}(\bar{t}) \rangle g_s^{(1)} g_s^{U(0)} + \langle n_{\bar{s}}^{(0)}(\bar{t}) \rangle g_s^{(0)} g_s^{U(1)} \right] \\ &+ \frac{i\hbar}{2} U \left[ \frac{\partial \langle n_{\bar{s}}(\bar{t}) \rangle}{\partial \bar{t}} \frac{\partial (g_s g_s^U)}{\partial \omega} - \langle n_{\bar{s}}^{(0)}(\bar{t}) \rangle \frac{\partial g_s^{(0)}}{\partial \bar{t}} \frac{\partial g_s^{U(0)}}{\partial \omega} + \langle n_{\bar{s}}^{(0)}(\bar{t}) \rangle \frac{\partial g_s^{(0)}}{\partial \omega} \frac{\partial g_s^{U(0)}}{\partial \bar{t}} \right]. \end{aligned} \quad (5.46)$$

Logo, temos que fazer a extensão analítica destas equações e calcular os coeficientes da expansão das funções de Green livre do ponto quântico,

$$g_s^r(t - t', \bar{t}) = -\frac{i}{\hbar} \theta(t - t') e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{t'}^t dt_1 \epsilon_s(t_1)}. \quad (5.47)$$

Para isto, expandimos a dependência temporal do nível de energia da ressonância em ordem linear, ou seja  $\epsilon_s(t_1) = \epsilon_s(\bar{t}) + (t_1 - \bar{t}) d\epsilon_s(\bar{t})/d\bar{t}$ , e obtemos

$$\int_{t'}^t dt_1 \epsilon_s(t_1) = \epsilon_s(\bar{t})(t - t') + O(3). \quad (5.48)$$

Vemos que  $g_s^{(1)r(a)}$  e  $g_s^{U(1)r(a)}$  se anulam, simplificando consideravelmente a Eq. (5.46). Adicionalmente, para  $\bar{g}_s^{(1)r}$  e  $\bar{g}_s^{(1)a}$  os últimos dois termos do lado direito da Eq. (5.46) se cancelam mutuamente dado que

$$g_s^{(0)r(a)}(\omega, \bar{t}) = \frac{1}{\omega - \epsilon_s(\bar{t}) \pm i\eta} \quad \text{e} \quad g_s^{U(0)r(a)}(\omega, \bar{t}) = \frac{1}{\omega - \epsilon_s(\bar{t}) - U \pm i\eta}, \quad (5.49)$$

de forma que

$$\frac{\partial g_s^{(0)r(a)}}{\partial \bar{t}}(\omega, \bar{t}) = -\frac{\partial g_s^{(0)r(a)}}{\partial \omega}(\omega, \bar{t}) \frac{d\epsilon_s(\bar{t})}{d\bar{t}} \quad (5.50)$$

e

$$\frac{\partial g_s^{U(0)r(a)}}{\partial \bar{t}}(\omega, \bar{t}) = -\frac{\partial g_s^{U(0)r(a)}}{\partial \omega}(\omega, \bar{t}) \frac{d\epsilon_s(\bar{t})}{d\bar{t}}. \quad (5.51)$$

Este cancelamento simples não acontece para  $\bar{g}_s^{(1)<}(\omega, \bar{t})$ . Finalmente, as funções de Green  $\bar{g}_s^{(0)r(a)}$  e  $\bar{g}_s^{(1)r(a)}$  se reduzem a

$$\bar{g}_s^{(0)r(a)}(\omega, \bar{t}) = g_s^{(0)r(a)}(\omega, \bar{t}) + \langle n_{\bar{s}}^{(0)}(\bar{t}) \rangle g_s^{(0)r(a)}(\omega, \bar{t}) U g_s^{U(0)r(a)}(\omega, \bar{t}) \quad (5.52)$$

e

$$\begin{aligned} \bar{g}_s^{(1)r(a)}(\omega, \bar{t}) &= \langle n_{\bar{s}}^{(1)}(\bar{t}) \rangle g_s^{(0)r(a)}(\omega, \bar{t}) U g_s^{U(0)r(a)}(\omega, \bar{t}) \\ &+ \frac{i\hbar}{2} U \frac{\partial \langle n_{\bar{s}}^{(0)}(\bar{t}) \rangle}{\partial \bar{t}} \frac{\partial}{\partial \omega} [g_s^{(0)r(a)}(\omega, \bar{t}) g_s^{U(0)r(a)}(\omega, \bar{t})]. \end{aligned} \quad (5.53)$$

Por sua vez, as funções de Green menor  $\bar{g}_s^{(0)<}$  e  $\bar{g}_s^{(1)<}$  são

$$\bar{g}_s^{(0)<}(\omega, \bar{t}) = f(\omega) [\bar{g}_s^{(0)a}(\omega, \bar{t}) - \bar{g}_s^{(0)r}(\omega, \bar{t})] \quad (5.54)$$

e

$$\begin{aligned} \bar{g}_s^{(1)<}(\omega, \bar{t}) &= U \langle n_{\bar{s}}^{(1)}(\bar{t}) \rangle f(\omega) [g_s^{(0)a}(\omega, \bar{t}) g_s^{U(0)a}(\omega, \bar{t}) - g_s^{(0)r}(\omega, \bar{t}) g_s^{U(0)r}(\omega, \bar{t})] \\ &+ \frac{i\hbar}{2} U \frac{\partial \langle n_{\bar{s}}^{(0)}(\bar{t}) \rangle}{\partial \bar{t}} \frac{\partial}{\partial \omega} \{f(\omega) [g_s^{(0)a}(\omega, \bar{t}) g_s^{U(0)a}(\omega, \bar{t}) - g_s^{(0)r}(\omega, \bar{t}) g_s^{U(0)r}(\omega, \bar{t})]\} \\ &+ \frac{i\hbar}{2} U \langle n_{\bar{s}}^{(0)}(\bar{t}) \rangle \frac{\partial f(\omega)}{\partial \omega} \left\{ [g_s^{(0)a}(\omega, \bar{t}) - g_s^{(0)r}(\omega, \bar{t})] \frac{\partial g_s^{U(0)a}}{\partial \bar{t}}(\omega, \bar{t}) \right. \\ &\quad \left. - \frac{\partial g_s^{(0)r}}{\partial \bar{t}}(\omega, \bar{t}) [g_s^{U(0)a}(\omega, \bar{t}) - g_s^{U(0)r}(\omega, \bar{t})] \right\}. \end{aligned} \quad (5.55)$$

Procedendo da mesma forma, reescrevemos a Eq. (5.37) em termos da parametrização definida na Eq. (5.39),

$$\begin{aligned} G_{ss}(t-t', \bar{t}) &= \bar{g}_s(t-t', \bar{t}) + \int dt_1 dt_2 \bar{g}_s(t-t_1, \frac{t+t_1}{2}) \\ &\times \left[ \sum_{k\alpha} V_{k\alpha}^*(t_1) g_{k\alpha s}(t_1-t_2) V_{k\alpha}(t_2) \right] G_{ss}(t_2-t', \frac{t_2+t'}{2}), \end{aligned} \quad (5.56)$$

e expandindo até a ordem linear na variável lenta, em torno do tempo médio escrevemos

$$\begin{aligned} G_{ss}(t-t', \bar{t}) &= \bar{g}_s(t-t', \bar{t}) + \int dt_1 \int dt_2 \left[ \bar{g}_s(t-t_1, \bar{t}) + \frac{t_1-t_2+t_2-t'}{2} \frac{\partial}{\partial \bar{t}} \bar{g}_s(t-t_1, \bar{t}) \right] \\ &\times \sum_{k\alpha} \left[ V_{k\alpha}^*(\bar{t}) + \frac{t_1-t+t_1-t'}{2} \dot{V}_{k\alpha}^*(\bar{t}) \right] g_{k\alpha s}(t_1-t_2) \left[ V_{k\alpha}(\bar{t}) + \frac{t_2-t+t_2-t'}{2} \dot{V}_{k\alpha}(\bar{t}) \right] \\ &\times \left[ G_{ss}(t_2-t', \bar{t}) + \frac{t_2-t_1+t_1-t}{2} \frac{\partial}{\partial \bar{t}} G_{ss}(t_2-t', \bar{t}) \right]. \end{aligned} \quad (5.57)$$

Tomando a transformada de Fourier de  $G_{ss}(t-t', \bar{t})$  com respeito da variável rápida  $t-t'$  e expressando o resultado a ordem linear nas variáveis lentas, escrevemos

$$G_{ss}(\omega, \bar{t}) = G_{ss}^{(0)}(\omega, \bar{t}) + G_{ss}^{(1)}(\omega, \bar{t}), \quad (5.58)$$

onde o termo de ordem zero é a função de Green de equilíbrio, solução da equação de Dyson

$$G_{ss}^{(0)}(\omega, \bar{t}) = \bar{g}_s^{(0)}(\omega, \bar{t}) + \bar{g}_s^{(0)}(\omega, \bar{t})\Sigma_s(\omega, \bar{t})G_{ss}^{(0)}(\omega, \bar{t}), \quad (5.59)$$

com  $\Sigma_s(\omega, \bar{t}) = \int d(t-t')e^{i\omega(t-t')/\hbar}\Sigma_s(t-t', \bar{t})$  e a auto energia  $\Sigma_s(t-t', \bar{t})$  definida pela Eq. (5.38).

A correção de primeira ordem é

$$\begin{aligned} G_{ss}^{(1)}(\omega, \bar{t}) &= \bar{g}_s^{(1)}(\omega, \bar{t}) + \bar{g}_s^{(1)}(\omega, \bar{t})\Sigma_s(\omega, \bar{t})G_{ss}^{(0)}(\omega, \bar{t}) + \bar{g}_s^{(0)}(\omega, \bar{t})\Sigma_s(\omega, \bar{t})G_{ss}^{(1)}(\omega, \bar{t}) \\ &- \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial \bar{g}_s^{(0)}}{\partial \bar{t}}(\omega, \bar{t}) \frac{\partial}{\partial \omega} [\Sigma_s(\omega, \bar{t})G_{ss}^{(0)}(\omega, \bar{t})] \\ &+ \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial \omega} [\bar{g}_s^{(0)}(\omega, \bar{t})\Sigma_s(\omega, \bar{t})] \frac{\partial G_{ss}^{(0)}}{\partial \bar{t}}(\omega, \bar{t}) \\ &+ \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial \bar{g}_s^{(0)}}{\partial \omega}(\omega, \bar{t}) \frac{\partial \Sigma_s}{\partial \bar{t}}(\omega, \bar{t})G_{ss}^{(0)}(\omega, \bar{t}) \\ &- \frac{i\hbar}{2} \bar{g}_s^{(0)}(\omega, \bar{t}) \frac{\partial \Sigma_s}{\partial \bar{t}}(\omega, \bar{t}) \frac{\partial G_{ss}^{(0)}}{\partial \omega}(\omega, \bar{t}) \\ &- \frac{i\hbar}{2} \bar{g}_s^0(\omega, \bar{t})\mathcal{S}^{(1)}(\omega, \bar{t})G_{ss}^{(0)}(\omega, \bar{t}) \end{aligned} \quad (5.60)$$

com

$$\mathcal{S}^{(1)}(\omega, \bar{t}) = \sum_{k\alpha} \left[ \dot{V}_{k\alpha}^*(\bar{t})V_{k\alpha}(\bar{t}) - V_{k\alpha}^*(\bar{t})\dot{V}_{k\alpha}(\bar{t}) \right] \frac{\partial g_{k\alpha s}}{\partial \omega}(\omega, \bar{t}). \quad (5.61)$$

### 5.4.2 Cálculo auto-consistente de $G_{ss}^{(0)}(\omega, \bar{t})$

Na seção 5.3.2 foi sinalizado que para o cálculo das funções de Green,  $G_{ss}(\tau, \tau')$ , seria preciso realizar um cálculo auto-consistente. Nesta seção realizamos tal cálculo para o termo de ordem zero da função de Green  $G_{ss}^{(0)r}(\omega, \bar{t})$ . Antes de prosseguir é conveniente fazer algumas considerações referentes às auto-energias "parciais",

$$\Sigma_{\alpha s}(\omega, \bar{t}) \equiv \sum_k V_{k\alpha}^*(\bar{t})g_{k\alpha s}(\omega, \bar{t})V_{k\alpha}(\bar{t}), \quad (5.62)$$

relacionadas à auto-energia por  $\Sigma_s = \sum_{\alpha} \Sigma_{\alpha s}$ .

Assumindo que a dependência em  $k$  dos elementos da matriz de acoplamento seja fraca e que a largura de banda dos canais seja grande,  $\Sigma_{\alpha s}$  pode ser escrita em termos de amplitudes de decaimento  $\Gamma_\alpha$ , segundo

$$\Sigma_{\alpha s}^{r(a)}(\omega, \bar{t}) = \mp i \frac{\Gamma_\alpha(\bar{t})}{2} \quad \text{e} \quad \Sigma_{\alpha s}^<(\omega, \bar{t}) = if(\omega)\Gamma_\alpha(\bar{t}), \quad (5.63)$$

com

$$\Gamma_\alpha(\bar{t}) = 2\pi |V_\alpha(\bar{t})|^2 \rho_\alpha. \quad (5.64)$$

Aqui também temos assumido que  $\rho_\alpha$ , a densidade de estados no fio  $\alpha$ , é constante. Por conveniência de notação introduzimos também a largura de decaimento total  $\Gamma$ , definida como  $\Gamma = \sum_\alpha \Gamma_\alpha$ .

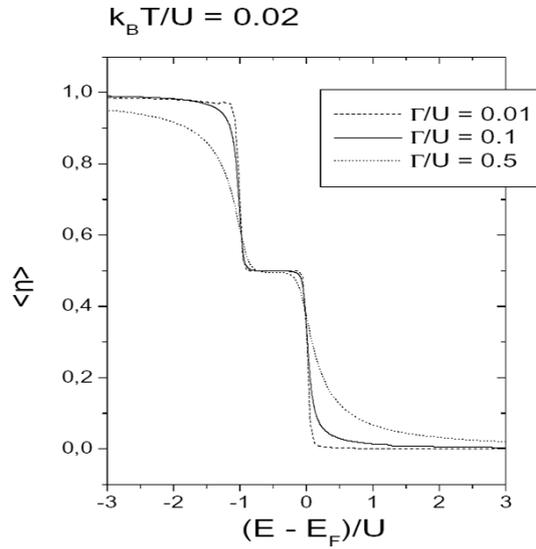


Figura 5.2: Cálculo auto-consistente de  $\langle n_s^0(\bar{t}) \rangle$ , como função de  $\varepsilon_s(\bar{t}) - \varepsilon_F$ , para três valores fixos de  $\Gamma(\bar{t})$ .

Voltando ao cálculo de  $G_{ss}^{(0)r}(\omega, \bar{t})$ , as Eqs. (5.29), (5.30) e (5.45) conduzem à expressão

$$G_{ss}^{(0)r}(\omega, \bar{t}) = \frac{\omega - \varepsilon_s(\bar{t}) + U (\langle n_s^0(\bar{t}) \rangle - 1)}{[\omega - \varepsilon_s(\bar{t})][\omega - \varepsilon_s(\bar{t}) - U] + i \frac{\Gamma(\bar{t})}{2} [\omega - \varepsilon_s(\bar{t}) - U (\langle n_s^0(\bar{t}) \rangle - 1)]}. \quad (5.65)$$

O teorema de flutuação dissipação [66] nos permite escrever

$$\langle n_s^0(\bar{t}) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi i} G_{ss}^{(0)<}(\omega, \bar{t}) = -\frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega f(\omega) \text{Im} [G_{ss}^{(0)r}(\omega, \bar{t})]. \quad (5.66)$$

Logo,  $\langle n_s^0(\bar{t}) \rangle$  é calculado iterativamente, a partir de um valor inicial arbitrário, por meio das Eqs. (5.65) e (5.69). Na Fig. 5.2, mostra-se o resultado do cálculo numérico e auto-consistente, de  $\langle n_s^0(\bar{t}) \rangle$ , para três valores fixos do parâmetro  $\Gamma(\bar{t})$ .

Tendo calculado  $\langle n_s^0(\bar{t}) \rangle$ , a Eq. (5.65) nos permite calcular  $G_{ss}^{(0)r}(\omega, \bar{t})$ , e dado que a ordem zero corresponde à dinâmica de equilíbrio, o teorema de flutuação-dissipação nos permite calcular trivialmente a componente menor da função de Green  $G_{ss}^{(0)<}(\omega, \bar{t})$ .

### 5.4.3 Cálculo auto-consistente de $G_{ss}^{(1)}(\omega, \bar{t})$

Para o cálculo da corrente de bombeamento, precisaremos de expressões explícitas para  $G_{ss}^{(1)r}$  e  $G_{ss}^{(1)<}$ . Aplicando as regras de Langreth à Eq. (5.60), obtemos

$$G_{ss}^{(1)r}(\omega, \bar{t}) = \frac{1}{1 - \bar{g}_s^{(0)r}(\omega, \bar{t}) \Sigma_s^r(\bar{t})} \left[ \bar{g}_s^{(1)r}(\omega, \bar{t}) + \bar{g}_s^{(1)r}(\omega, \bar{t}) \Sigma_s^r(\bar{t}) G_{ss}^{(0)r}(\omega, \bar{t}) \right. \\ - \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial \bar{g}_s^{(0)r}}{\partial \bar{t}}(\omega, \bar{t}) \Sigma_s^r(\bar{t}) \frac{\partial G_{ss}^{(0)r}}{\partial \omega}(\omega, \bar{t}) + \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial \bar{g}_s^{(0)r}}{\partial \omega}(\omega, \bar{t}) \Sigma_s^r(\bar{t}) \frac{\partial G_{ss}^{(0)r}}{\partial \bar{t}}(\omega, \bar{t}) \\ \left. + \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial \bar{g}_s^{(0)r}}{\partial \omega}(\omega, \bar{t}) \frac{\partial \Sigma_s^r}{\partial \bar{t}}(\bar{t}) G_{ss}^{(0)r}(\omega, \bar{t}) - \frac{i\hbar}{2} \bar{g}_s^{(0)r}(\omega, \bar{t}) \frac{\partial \Sigma_s^r}{\partial \bar{t}}(\bar{t}) \frac{\partial G_{ss}^{(0)r}}{\partial \omega}(\omega, \bar{t}) \right] \quad (5.67)$$

e

$$G_{ss}^{(1)<} = \frac{1}{1 - \bar{g}_s^{(0)r} \Sigma_s^r} \left[ \bar{g}_s^{(1)<} + \bar{g}_s^{(0)r} \Sigma_s^< G_{ss}^{(1)a} + \bar{g}_s^{(0)<} \Sigma_s^a G_{ss}^{(1)a} \right. \\ + \bar{g}_s^{(1)r} \Sigma_s^r G_{ss}^{(0)<} + \bar{g}_s^{(1)r} \Sigma_s^< G_{ss}^{(0)a} + \bar{g}_s^{(1)<} \Sigma_s^a G_{ss}^{(0)a} \\ - \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial \bar{g}_s^{(0)r}}{\partial \bar{t}} \frac{\partial}{\partial \omega} [\Sigma_s^r G_{ss}^{(0)<}] + \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial \omega} [\bar{g}_s^{(0)r} \Sigma_s^r] \frac{\partial G_{ss}^{(0)<}}{\partial \bar{t}} \\ + \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial \bar{g}_s^{(0)r}}{\partial \omega} \frac{\partial \Sigma_s^r}{\partial \bar{t}} G_{ss}^{(0)<} - \frac{i\hbar}{2} \bar{g}_s^{(0)r} \frac{\partial \Sigma_s^r}{\partial \bar{t}} \frac{\partial G_{ss}^{(0)<}}{\partial \omega} \\ - \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial \bar{g}_s^{(0)r}}{\partial \bar{t}} \frac{\partial}{\partial \omega} [\Sigma_s^< G_{ss}^{(0)a}] + \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial \omega} [\bar{g}_s^{(0)r} \Sigma_s^<] \frac{\partial G_{ss}^{(0)a}}{\partial \bar{t}} \\ + \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial \bar{g}_s^{(0)r}}{\partial \omega} \frac{\partial \Sigma_s^<}{\partial \bar{t}} G_{ss}^{(0)a} - \frac{i\hbar}{2} \bar{g}_s^{(0)r} \frac{\partial \Sigma_s^<}{\partial \bar{t}} \frac{\partial G_{ss}^{(0)a}}{\partial \omega} \\ - \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial \bar{g}_s^{(0)<}}{\partial \bar{t}} \frac{\partial}{\partial \omega} [\Sigma_s^a G_{ss}^{(0)a}] + \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial \omega} [\bar{g}_s^{(0)<} \Sigma_s^a] \frac{\partial G_{ss}^{(0)a}}{\partial \bar{t}} \\ \left. + \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial \bar{g}_s^{(0)<}}{\partial \omega} \frac{\partial \Sigma_s^a}{\partial \bar{t}} G_{ss}^{(0)a} - \frac{i\hbar}{2} \bar{g}_s^{(0)<} \frac{\partial \Sigma_s^a}{\partial \bar{t}} \frac{\partial G_{ss}^{(0)a}}{\partial \omega} \right], \quad (5.68)$$

onde omitimos a dependência funcional por razões de espaço. Finalmente, as funções de Green tem de ser calculadas auto-consistentemente usando a relação

$$\langle n_s^1(\bar{t}) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi i} G_{ss}^{(1)<}(\omega). \quad (5.69)$$

#### 5.4.4 Expressão da corrente na aproximação adiabática

Nesta seção trasladaremos a expressão da corrente bombeada, Eq. (5.21), às variáveis introduzidas na re-parametrização das funções de Green, Eq. (5.39). Desta forma, obteremos a expressão geral da corrente de bombeamento,  $J_\alpha(t)$ , no regime adiabático.

Para começar reescrevamos a expressão da corrente dada na Eq. (5.21), considerando o limite de banda larga com densidade de estados constante e elementos de matriz de acoplamentos  $V_{k\alpha}(t)$  independentes de  $k$  [44], ou seja

$$J_{\alpha s}(t) = -\frac{e}{\hbar} \text{Im} \left[ \frac{\tilde{\Gamma}_\alpha(t, t)}{2} G_{ss}^<(t, t) + \int \frac{d\omega}{2\pi} f(\omega) \int dt' e^{-i\omega(t-t')/\hbar} \tilde{\Gamma}_\alpha(t', t) G_{ss}^r(t, t') \right]. \quad (5.70)$$

Aqui introduzimos a largura de decaimento de dois tempos

$$\tilde{\Gamma}_\alpha(t, t') = 2\pi V_\alpha^*(t) V_\alpha(t') \rho_\alpha. \quad (5.71)$$

Notemos que para  $t \neq t'$  a largura de decaimento  $\tilde{\Gamma}_\alpha$  não é necessariamente real. Mas, para  $t = t'$ , ela é igual à largura de decaimento padrão  $\tilde{\Gamma}_\alpha(t, t) = \Gamma_\alpha(t)$ .

Antes de avançar e reescrever a equação da corrente bombeada em termos das funções de Green obtidas mediante a aproximação adiabática, é interessante identificar, na expressão da corrente, duas contribuições de natureza diferente: Uma devida às flutuações, relacionada com a injeção de carga, e portanto, ao termo correspondente à função de Green menor. A outra é devida à dissipação, correspondente à função de Green retardada. Desta forma escrevemos

$$J_{\alpha s}(t) \equiv J_{\alpha s}^{\text{fl}}(t) + J_{\alpha s}^{\text{dis}}(t), \quad (5.72)$$

Com as correntes de flutuação  $J_{\alpha s}^{\text{fl}}(t)$  e dissipação  $J_{\alpha s}^{\text{dis}}(t)$  dadas pela primeira e segunda parcela da Eq. (5.70), respectivamente.

Para reescrever a corrente de flutuação é suficiente usar a relação

$$G_{ss}^<(t, t) \longrightarrow G_{ss}^<(0, t) = \int \frac{d\omega}{2\pi} G_{ss}^<(\omega, t), \quad (5.73)$$

o que conduz a

$$J_{\alpha s}^{\text{fl}}(t) = -\frac{e}{\hbar} \text{Im} \left[ \frac{\Gamma_\alpha(t)}{2} \int \frac{d\omega}{2\pi} G_{ss}^<(\omega, t) \right]. \quad (5.74)$$

Enquanto que para reescrever a corrente de dissipação, é preciso substituir

$$G_{ss}(t, t') \longrightarrow G_{ss}(t - t', \frac{t + t'}{2}) \approx G_{ss}(t - t', t) + \frac{t' - t}{2} \frac{\partial G_{ss}}{\partial \bar{t}}(t - t', \bar{t}) \Big|_{\bar{t}=t}, \quad (5.75)$$

$$\begin{aligned}\tilde{\Gamma}_\alpha(t', t) &\approx \Gamma_\alpha(t) + (t' - t) \frac{\partial \tilde{\Gamma}_\alpha(\bar{t}, t)}{\partial \bar{t}} \Big|_{\bar{t}=t} \\ &= \Gamma_\alpha(t) + \frac{t' - t}{2} \dot{\gamma}_\alpha(t)\end{aligned}\quad (5.76)$$

e em seguida realizar a integração na variável  $t'$ . Na segunda linha da Eq. (5.76) definimos  $\dot{\gamma}_\alpha(t)/2 = \partial \tilde{\Gamma}_\alpha(\bar{t}, t)/\partial \bar{t}|_{\bar{t}=t}$  para simplificar a notação. Note-se que para  $B = 0$ , ambos  $\dot{\gamma}_\alpha(t)$  e  $\dot{\Gamma}_\alpha(t)$  coincidem. Finalmente, a corrente de dissipação é dada por

$$J_{\alpha s}^{\text{dis}}(t) \approx -\frac{e}{\hbar} \text{Im} \left\{ \int \frac{d\omega}{2\pi} f(\omega) \left[ \Gamma_\alpha(t) G_{ss}^r(\omega, t) + \frac{i\hbar}{2} \dot{\gamma}_\alpha(t) \frac{\partial G_{ss}^r(\omega, t)}{\partial \omega} + \frac{i\hbar}{2} \Gamma_\alpha(t) \frac{\partial^2 G_{ss}^r(\omega, t)}{\partial \omega \partial t} \right] \right\}. \quad (5.77)$$

Na sequência, expandimos formalmente as funções de Green e a corrente em potências da variável lenta, ou seja

$$G_{ss}(\omega, t) = G_{ss}^{(0)}(\omega, t) + G_{ss}^{(1)}(\omega, t) \quad (5.78)$$

e

$$J_{\alpha s}(t) = J_{\alpha s}^{(0)}(t) + J_{\alpha s}^{(1)}(t). \quad (5.79)$$

A corrente de ordem zero  $J_{\alpha s}^{(0)}(t)$  anula-se já que representa a corrente do sistema na situação de equilíbrio correspondente ao instante de tempo  $t$ . Do ponto de vista formal, o resultado é consequência imediata do teorema de flutuação-dissipação.

A correção de primeira ordem à corrente devida às flutuações é dada por

$$J_{\alpha s}^{(1)\text{fl}}(t) = -\frac{e}{\hbar} \text{Im} \left[ \frac{\Gamma_\alpha(t)}{2} \int \frac{d\omega}{2\pi} G_{ss}^{(1)<}(\omega, t) \right], \quad (5.80)$$

e o termo de primeira ordem proveniente da corrente de dissipação é

$$\begin{aligned}J_{\alpha s}^{(1)\text{dis}}(t) &= -\frac{e}{\hbar} \text{Im} \left[ \Gamma_\alpha(t) \int \frac{d\omega}{2\pi} f(\omega) G_{ss}^{(1)r}(\omega, t) \right] \\ &- \frac{e}{2} \text{Re} \left\{ \int \frac{d\omega}{2\pi} \left( -\frac{\partial f}{\partial \omega} \right) \left[ \dot{\gamma}_\alpha(t) G_{ss}^{(0)r}(\omega, t) + \Gamma_\alpha(t) \frac{\partial G_{ss}^{(0)r}(\omega, t)}{\partial t} \right] \right\}. \quad (5.81)\end{aligned}$$

Derivamos assim um conjunto de equações que permite calcular a corrente de bombeamento adiabático num ponto quântico no regime de Coulomb. No apêndice A estes resultados são testados ao comparar o limite não interagente de nossas equações com os resultados de Brouwer [56].

# Capítulo 6

## Conclusões

O ponto de partida desta tese foi apresentar uma derivação da fórmula de Landauer usando o formalismo de Keldysh. Isto permitiu-nos familiarizarmos com duas das principais ferramentas usadas para descrever o transporte de elétrons em sistemas mesoscópicos, a saber: o formalismo de matrizes de espalhamento (FMS), ao qual a fórmula de Landauer pertence, e o formalismo de funções de Green fora de equilíbrio, também conhecido como formalismo de Keldysh (FK).

O FMS tem permitido descrever uma grande variedade de fenômenos, a maioria deles relacionados a processos dominados pela física de partículas independentes. Já o formalismo de funções de Green fora de equilíbrio é de maior utilidade para descrever problemas de muitos corpos. Portanto, uma ponte entre os dois formalismos é de grande utilidade, já que permite transportar os desenvolvimentos prévios ao nosso novo marco de trabalho. Um bom exemplo disto foi apresentado no capítulo 3, onde a descrição do transporte não linear em termos de matrizes de espalhamento serviu de guia na derivação de uma descrição equivalente em termos de funções de Green fora de equilíbrio. A nova descrição se mostrou mais completa e versátil. A equação para os potenciais característicos foi obtidas de forma natural para qualquer ordem, entanto que no FME isto só foi possível dentro da aproximação de Thomas-Fermi. O FK nos proporcionou a expressão exata da função de Lindhard (3.41), coisa que não se tinha no FME. Finalmente, o formalismo de Keldysh também nos permitiu aprimorar o nível de aproximação no qual a interação elétron-elétron é considerada. Na seção 5.3.1 descrevemos as modificações necessárias para considerar a aproximação de Hartree-Fock, incluindo desta forma a interação de troca, uma parte muito importante da física de muitos corpos.

No capítulo 4, usamos um modelo simples de anel quântico para calcular as quan-

tidades envolvidas na descrição do transporte não linear em termos do FMS, a saber: matriz de espalhamento, condutância linear  $G^{(1)}$ , derivada funcional da matriz de espalhamento, injetividade, emisividade, potencial característico  $u_\alpha(x)$ , primeira correção não linear  $G^{(2)}$ , e o potencial característico de segunda ordem  $u_{\alpha\beta}(x)$ . Desta forma, foi possível abordar algumas questões encontradas nos resultados experimentais da Ref. [12].

No que diz respeito das possibilidades interferométricas da condutância não linear num anel com dois contatos, encontramos um conjunto de parâmetros para os quais a fase da condutância não linear exibiu um comportamento similar ao apresentado na Ref. [12]. Ou seja, a fase do primeiro harmônico apresentou um comportamento monotonicamente crescente como função da fase introduzida. Porém, os nossos resultados sinalizaram para um inconveniente grave. A fase observada em função da fase introduzida não é, na totalidade dos casos, uma função unívoca. Isto impossibilita a inversão da função e, conseqüentemente, a funcionalidade do interferômetro. Além disso a presença de dificuldades adicionais, não incluídas no nosso modelo foram mencionadas, como por exemplo: a sensibilidade do interferômetro à temperatura na qual o experimento foi realizado e a falha no mecanismo para introduzir a fase, já que os potenciais de porta introduzem fases diferentes para cada canal.

Com respeito das simetrias sob inversão do campo magnético dos diferentes coeficientes da condutância, encontramos que a presença de uma simetria de reflexão poderia explicar a paridade apresentada pelos coeficientes  $G^{(3)}$  e  $G^{(5)}$ , porém, os coeficientes  $G^{(2)}$  e  $G^{(4)}$  teriam de apresentar um comportamento ímpar não observado experimentalmente. Uma possível explicação para este fato poderia ser a presença de uma contribuição não linear, de natureza par e diferente da considerada por nós. Por último, o cenário de um anel com a simetria de reflexão também permitiu explicar a ausência das oscilações de período  $h/2e$  nos coeficientes  $G^{(2)}$  e  $G^{(4)}$ .

Finalmente, no capítulo 5 usamos o formalismo de funções de Green fora de equilíbrio para descrever o transporte eletrônico dependente do tempo em pontos quânticos com interação. Como resultado se obteve um conjunto de equações que permitem calcular a corrente bombeada adiabaticamente num ponto quântico no regime de bloqueio de Coulomb.

# Apêndice A

## Limite ao caso não interagente.

A fim de testar os nossos resultados, tomaremos o limite ao caso não interagente,  $U \rightarrow 0$ , e compararemos os nossos resultados com os de Brouwer [56]. Em este caso

$$\bar{g}_s^{(0)}(\omega, \bar{t}) = g_s^{(0)}(\omega), \quad \bar{g}_s^{(1)}(\omega, \bar{t}) = 0 \quad (\text{A.1})$$

e  $G^{(1)}$  é dada pela seguinte expressão

$$\begin{aligned} G_{ss}^{(1)}(\omega, \bar{t}) &= g_s^{(0)}(\omega) \Sigma_s(\omega, \bar{t}) G_{ss}^{(1)}(\omega, \bar{t}) \\ &- \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial g_s^{(0)}}{\partial \bar{t}}(\omega) \frac{\partial}{\partial \omega} [\Sigma_s(\omega, \bar{t}) G_{ss}^{(0)}(\omega, \bar{t})] + \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial \omega} [g_s^{(0)}(\omega) \Sigma_s(\omega, \bar{t})] \frac{\partial G_{ss}^{(0)}}{\partial \bar{t}}(\omega, \bar{t}) \\ &+ \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial g_s^{(0)}}{\partial \omega}(\omega) \frac{\partial \Sigma_s}{\partial \bar{t}}(\omega, \bar{t}) G_{ss}^{(0)}(\omega, \bar{t}) - \frac{i\hbar}{2} g_s^{(0)}(\omega) \frac{\partial \Sigma_s}{\partial \bar{t}}(\omega, \bar{t}) \frac{\partial G_{ss}^{(0)}}{\partial \omega}(\omega, \bar{t}). \end{aligned} \quad (\text{A.2})$$

Aplicando as regras de Langreth a esta expressão, se tem

$$\begin{aligned} G_{ss}^{(1)r(a)}(\omega, \bar{t}) &= g_s^{r(a)}(\omega) \Sigma_s^{r(a)}(\omega, \bar{t}) G_{ss}^{(1)r(a)}(\omega, \bar{t}) + \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial g_s^{r(a)}}{\partial \omega}(\omega) \Sigma_s^{r(a)}(\bar{t}) \frac{\partial G_{ss}^{(0)r(a)}}{\partial \bar{t}}(\omega, \bar{t}) \\ &+ \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial g_s^{r(a)}}{\partial \omega}(\omega) \frac{\partial \Sigma_s^{r(a)}}{\partial \bar{t}}(\bar{t}) G_{ss}^{(0)r(a)}(\omega, \bar{t}) - \frac{i\hbar}{2} g_s^{r(a)}(\omega) \frac{\partial \Sigma_s^{r(a)}}{\partial \bar{t}}(\bar{t}) \frac{\partial G_{ss}^{(0)r(a)}}{\partial \omega}(\omega, \bar{t}), \end{aligned} \quad (\text{A.3})$$

onde omitimos o super-índice (0) na função  $g_s^{(0)r(a)}(\omega)$ . De agora em diante, simplificaremos ainda mais a notação.

Antes de escrever a função de Green menor, mostraremos que  $G^{(1)r(a)}$  se cancela:

$$\begin{aligned} G^{(1)r} &= \frac{i\hbar}{2} \left[ \frac{G^{(0)r}}{g^r} \right] \partial_t \Sigma^r [-(g^r)^2 G^{(0)r} - (g^r)^2 \Sigma^r (G^{(0)r})^2 + g^r (G^{(0)r})^2] \\ &= \frac{i\hbar}{2} \partial_t \Sigma^r (G^{(0)r})^2 [G^{(0)r} - g^r - g^r \Sigma^r G^{(0)r}] \\ &= \frac{i\hbar}{2} \partial_t \Sigma^r (G^{(0)r})^2 [0] = 0. \end{aligned} \quad (\text{A.4})$$

Invocando novamente o teorema de Langreth, obtemos que a função de Green menor é

$$\begin{aligned}
 G^{(1)<} &= g^r \Sigma^r G^{(1)<} + g^r \Sigma^< G^{(1)a} + g^< \Sigma^a G^{(1)a} \\
 &+ \frac{i\hbar}{2} \{ \partial_\omega, \partial_{\bar{t}} \} [ g^r \Sigma^r (f(\omega) G^{(0)a}) - g^r \Sigma^r (f(\omega) G^{(0)r}) \\
 &\quad + g^r (f(\omega) \Sigma^a) G^{(0)a} - g^r (f(\omega) \Sigma^r) G^{(0)a} \\
 &\quad + (f(\omega) g^a) \Sigma^a G^{(0)a} - (f(\omega) g^r) \Sigma^a G^{(0)a} ] \quad (A.5)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 G^{(1)<} &= \left( \frac{G^{(0)r}}{g^r} \right) \left( \frac{i\hbar}{2} \right) \left[ +^{(1)} \partial_\omega g^r \Sigma^r (f(\omega) \partial_{\bar{t}} G^{(0)a}) + ^{(2)} \partial_\omega g^r \partial_{\bar{t}} \Sigma^r (f(\omega) G^{(0)a}) \right. \\
 &- ^{(3)} g^r \partial_{\bar{t}} \Sigma^r (\partial_\omega f(\omega) G^{(0)a}) - ^{(4)} g^r \partial_{\bar{t}} \Sigma^r (f(\omega) \partial_\omega G^{(0)a}) \\
 &- \partial_\omega g^r \Sigma^r (f(\omega) \partial_{\bar{t}} G^{(0)r}) - \partial_\omega g^r \partial_{\bar{t}} \Sigma^r (f(\omega) G^{(0)r}) \\
 &+ g^r \partial_{\bar{t}} \Sigma^r (\partial_\omega f(\omega) G^{(0)r}) + g^r \partial_{\bar{t}} \Sigma^r (f(\omega) \partial_\omega G^{(0)r}) \\
 &+ ^{(-1)} \partial_\omega g^r (f(\omega) \Sigma^a) \partial_{\bar{t}} G^{(0)a} + ^{(-2)} \partial_\omega g^r (f(\omega) \partial_{\bar{t}} \Sigma^a) G^{(0)a} \\
 &- ^{(9)} g^r (\partial_\omega f(\omega) \Sigma^a) \partial_{\bar{t}} G^{(0)a} - ^{(-4)} g^r (f(\omega) \partial_{\bar{t}} \Sigma^a) \partial_\omega G^{(0)a} \\
 &- ^{(-1)} \partial_\omega g^r (f(\omega) \Sigma^r) \partial_{\bar{t}} G^{(0)a} - ^{(-2)} \partial_\omega g^r (f(\omega) \partial_{\bar{t}} \Sigma^r) G^{(0)a} \\
 &+ g^r (\partial_\omega f(\omega) \Sigma^r) \partial_{\bar{t}} G^{(0)a} + ^{(10)} g^r (f(\omega) \partial_{\bar{t}} \Sigma^r) \partial_\omega G^{(0)a} \\
 &+ (\partial_\omega f(\omega) g^a) \Sigma^a \partial_{\bar{t}} G^{(0)a} + (\partial_\omega f(\omega) g^a) \partial_{\bar{t}} \Sigma^a G^{(0)a} + (f(\omega) \partial_\omega g^a) \Sigma^a \partial_{\bar{t}} G^{(0)a} \\
 &+ (f(\omega) \partial_\omega g^a) \partial_{\bar{t}} \Sigma^a G^{(0)a} - (f(\omega) g^a) \partial_{\bar{t}} \Sigma^a \partial_\omega G^{(0)a} \\
 &- ^{(-9)} (\partial_\omega f(\omega) g^r) \Sigma^a \partial_{\bar{t}} G^{(0)a} - ^{(-3)} (\partial_\omega f(\omega) g^r) \partial_{\bar{t}} \Sigma^a G^{(0)a} - ^{(1)} (f(\omega) \partial_\omega g^r) \Sigma^a \partial_{\bar{t}} G^{(0)a} \\
 &- ^{(2)} (f(\omega) \partial_\omega g^r) \partial_{\bar{t}} \Sigma^a G^{(0)a} + ^{(-10)} (f(\omega) g^r) \partial_{\bar{t}} \Sigma^a \partial_\omega G^{(0)a}, \quad (A.6)
 \end{aligned}$$

onde os sub-índices indicam os pares que cancelam. Restando desta forma

$$\begin{aligned}
 G^{(1)<} &= \left( \frac{G^{(0)r}}{g^r} \right) \left( \frac{i\hbar}{2} \right) f(\omega) \left[ - \partial_\omega g^r \Sigma^r \partial_{\bar{t}} G^{(0)r} - \partial_\omega g^r \partial_{\bar{t}} \Sigma^r G^{(0)r} \right. \\
 &\quad \left. + \partial_\omega g^a \Sigma^a \partial_{\bar{t}} G^{(0)a} + \partial_\omega g^a \partial_{\bar{t}} \Sigma^a G^{(0)a} - g^a \partial_{\bar{t}} \Sigma^a \partial_\omega G^{(0)a} \right] \\
 &+ \left( \frac{G^{(0)r}}{g^r} \right) \left( \frac{i\hbar}{2} \right) \partial_\omega f(\omega) \left[ g^r \partial_{\bar{t}} \Sigma^r G^{(0)r} + g^r \Sigma^r \partial_{\bar{t}} G^{(0)a} + g^a \Sigma^a \partial_{\bar{t}} G^{(0)a} + g^a \partial_{\bar{t}} \Sigma^a G^{(0)a} \right]. \quad (A.7)
 \end{aligned}$$

Após calcular as derivadas, uma grande parte dos termos cancelam e a expressão se reduzem a

$$G^{(1)<} = \left( \frac{i\hbar}{2} \right) \partial_\omega f(\omega) \left[ \partial_{\bar{t}} G^{(0)r} + \partial_{\bar{t}} G^{(0)a} \right] \quad (A.8)$$

Introduzindo as Eqs. (A.4) e (A.8) nas expressões para a corrente (5.80) e (5.81), temos

$$\begin{aligned}
 J_{\alpha s}^{(1)\text{fl}}(t) &= \frac{e}{\hbar} \text{Im} \left\{ \frac{\Gamma_{\alpha}(t)}{2} \int \frac{d\omega}{2\pi} \left( \frac{i\hbar}{2} \right) \left( -\frac{\partial f}{\partial \omega} \right) \left[ \partial_{\bar{t}} G^{(0)r} + \partial_{\bar{t}} G^{(0)a} \right] \right\} \\
 &= \frac{e}{4} \Gamma_{\alpha}(t) \int \frac{d\omega}{2\pi} \left( -\frac{\partial f}{\partial \omega} \right) \text{Re} \{ \partial_{\bar{t}} G^{(0)r} + \partial_{\bar{t}} G^{(0)a} \} \\
 &= \frac{e}{2} \Gamma_{\alpha}(t) \int \frac{d\omega}{2\pi} \left( -\frac{\partial f}{\partial \omega} \right) \text{Re} \{ \partial_{\bar{t}} G^{(0)r} \}
 \end{aligned} \tag{A.9}$$

e

$$J_{\alpha s}^{(1)\text{dis}}(t) = -\frac{e}{2} \text{Re} \left\{ \int \frac{d\omega}{2\pi} \left( -\frac{\partial f}{\partial \omega} \right) \left[ \dot{\Gamma}_{\alpha}(t) G_{ss}^{(0)r}(\omega, t) + \Gamma_{\alpha}(t) \frac{\partial G_{ss}^{(0)r}}{\partial t}(\omega, t) \right] \right\}. \tag{A.10}$$

Finalmente a corrente total se lê

$$J_{\alpha s}^{(1)}(t) = \frac{e}{2} \int \frac{d\omega}{2\pi} \left( -\frac{\partial f}{\partial \omega} \right) \dot{\Gamma}_{\alpha}(t) \text{Re} \{ G_{ss}^{(0)r}(\omega, t) \}, \tag{A.11}$$

o que confere com a expressão de Brouwer.

# Bibliografia

- [1] R. Landauer, IBM J. Res. Develop. **1**, 223 (1957).
- [2] Y. Imry and R. Landauer, Rev. Mod. Phys. **71**, S306 (1999).
- [3] D. K. Ferry and S. M. Goodnick, *Transport in Nanostructures* (Cambridge University Press, Cambridge, 2001).
- [4] S. Datta, *Electronic Transport in Mesoscopic Systems* (Cambridge University Press, Cambridge, 1996).
- [5] M. Grobis, I. G. Rau, R. M. Potok, and D. Goldhaber-Gordon, *cond-mat/0611480*.
- [6] M. Sigrist, T. Ihn, K. Ensslin, D. Loss, M. Reinwald, and W. Wegscheider Phys. Rev. Lett. **96**, 036804 (2006).
- [7] S. K. Watson, R. M. Potok, C. M. Marcus, and V. Umansky, Phys. Rev. Lett. **91**, 258301 (2003); M. Switkes, C.M. Marcus, K. Campman, and A. C. Gossard, Science **283**, 1905 (1999).
- [8] A. Löfgren et al., Phys. Rev. Lett. **92**, 046803 (2004); R. Leturcq, D. Sanchez, G. Götze, T. Ihn, K. Ensslin, D. C. Driscoll, and A. C. Gossard Phys. Rev. Lett. **96**, 126801 (2006); D. M. Zumbühl, C. M. Marcus, M. P. Hanson, and A. C. Gossard, Phys. Rev. Lett. **96**, 206802 (2006).
- [9] A. Löfgren, C. A. Marlow, I. Shorubalko, R. P. Taylor, P. Omling, L. Samuelson, and H. Linke, Phys. Rev. Lett. **92**, 046803 (2004).
- [10] C. A. Marlow, R. P. Taylor, M. Fairbanks, I. Shorubalko, and H. Linke, Phys. Rev. Lett. **96**, 116801 (2006).
- [11] D. M. Zumbühl, C. M. Marcus, M. P. Hanson, and A. C. Gossard, Phys. Rev. Lett. **96**, 206802 (2006).

- [12] R. Leturcq, D. Sánchez, G. Götz, T. Ihn, K. Ensslin, D. C. Driscoll, and A. C. Gossard, *Phys. Rev. Lett.* **96**, 126801 (2006).
- [13] L. Angers, E. Zakka-Bajjani, R. Deblock, S. Guéron, H. Bouchiat, A. Cavanna, U. Gennser, and M. Polianski, *Phys. Rev. B* **75**, 115309 (2007).
- [14] J. Wei, M Shimogawa, Z. Wang, I. Radu, R. Dormaier, and D. H. Cobden, *Phys. Rev. Lett.* **95**, 256601 (2005).
- [15] A. Nitzan and M. A. Ratner, *Science* **300**, 1384 (2003).
- [16] T. Christen and M. Büttiker, *Europhys. Lett.* **35**, 523 (1996).
- [17] D. Sánchez and M. Büttiker, *Phys. Rev. Lett.* **93**, 106802 (2004).
- [18] M. L. Polianski and M. Büttiker, *Phys. Rev. Lett.* **96**, 156804 (2006).
- [19] M. L. Polianski and M. Büttiker, *Phys. Rev. B* **76**, 205308 (2007).
- [20] B. Wang, J. Wang, and H. Guo, *J. Appl. Phys.* **86**, 5094 (1999).
- [21] B. Spivak and A. Zyuzin, *Phys. Rev. Lett.* **93**, 226801 (2004).
- [22] E. Deyo, B. Spivak, and A. Zyuzin, *Phys. Rev. B* **74**, 104205 (2006).
- [23] M. Büttiker, *J. Phys. Condens. Matter* **5**, 9361 (1993).
- [24] Y. Xue, S. Datta, and M. A. Ratner, *Chem. Phys.* **281**, 151 (2002).
- [25] P. W. Brouwer, *Phys. Rev. B* **58**, R10135 (1998).
- [26] I. L. Aleiner, B. L. Altshuler, A. Kamenev, *Phys. Rev. B* **62**, 10374 (2000).
- [27] M. Moskalets and M. Büttiker, *Phys. Rev. B* **64**, 201305 (2001).
- [28] J. N. H. J. Cremers and P. W. Brouwer, *Phys. Rev. B* **65**, 115333 (2002).
- [29] M. Moskalets and M. Büttiker, *Phys. Rev. B* **66**, 035306 (2002).
- [30] F. Tadei, M. Governale and R. Fazio, *Phys. Rev. B* **70**, 052510 (2004).
- [31] M. Blaauboer, *Phys. Rev. B* **65**, 235318 (2002).
- [32] E. R. Mucciolo, C. Chamon, C. M. Marcus, *Phys. Rev. Lett.* **89**, 146802 (2002).

- [33] M. Martinez-Mares, C. H. Lewenkopf and E. R. Mucciolo, *Phys. Rev. B* **69**, 085301 (2004).
- [34] M. Governale, F. Tadei and R. Fazio, *Phys. Rev. Lett.* **68**, 155324 (2003).
- [35] O. Entin-Wohlman, A. Aharony and Y. Levinson, *Phys. Rev. B* **65**, 195411 (2002).
- [36] M. G. Vavilov, V. Ambegaokar and I. L. Aleiner, *Phys. Rev. B* **63**, 195313 (2001).
- [37] H. Pothier, P. Lafarge, C. Urbina, D. Esteve and M. H. Devoret, *Europhysics Lett* **17**, 249 (1992).
- [38] M. Switkes, C. M. Marcus, K. Chapman and A. C. Gossard, *Science* **283**, 1905 (1999).
- [39] S. Watson, R. M. Potok, C.M. Marcus and V. Umansky, *Phys. Rev. Lett.* **25**, 258301 (2003).
- [40] T. Aono, *Phys. Rev. Lett.* **93**, 116601 (2004).
- [41] I. L. Aleiner and A. V. Andreev, *Phys. Rev. Lett.* **81**, 1286 (1998).
- [42] P. W. Brouwer, A. Lamacraft and K. Flensberg, *Phys. Rev. B* **72**, 075316 (2005).
- [43] E. Cota, R. Aguado and G. Platero, *Phys. Rev. Lett.* **94**, 107202 (2005).
- [44] J. Splettstoesser, M. Governale, J. König, and R. Fazio, *Phys. Rev. Lett.* **95**, 246803 (2005).
- [45] P. Sela and Y. oreg, *Phys. Rev. Lett.* **96**, 166802 (2006).
- [46] J. Splettstoesser, M. Governale, J. König and R. Fazio, *Phys. Rev. B* **74**, 085305 (2006).
- [47] A. Hernández, V. M. Apel, F. A. Pinheiro, and C. H. Lewenkopf, *Physica A* **385**, 148 (2007).
- [48] T. Ando, *Phys. Rev. B* **44**, 8017 (1991).
- [49] J. Taylor, H. Guo, and J. Wang, *Phys. Rev. B* **63**, 245407 (2001).
- [50] F. Evers, F. Weigend, and M. Koentopp, *Phys. Rev. B* **69**, 235411 (2004).

- [51] J. B. Neaton, K. H. Khoo, C. D. Spataru, and S. G. Louie, *Comp. Phys. Comm.* **169**, 1 (2005).
- [52] P. A. Khomyakov, G. Brocks, V. Karpan, M. Zwierzycki, and P. J. Kelly, *Phys. Rev. B* **72**, 035450 (2005).
- [53] P. A. Mello and N. Kumar, *Quantum Transport in Mesoscopic Systems* (Oxford University Press, 2004).
- [54] K. Flensberg, *Phys. Rev. B* **48**, 11156 (1993).
- [55] K. A. Matveev, *Phys. Rev. B* **51**, 1743 (1995); A. Furusaky and K. A. Matveev, *Phys. Rev. Lett.* **75**, 709 (1995).
- [56] P. W. Brouwer, A. Lamacraft, and K. Flensberg, *Phys. Rev. Lett.* **94**, 136801 (2005); *Phys. Rev. B* **72**, 075316 (2005).
- [57] R. Lake, G. Klimeck, R. C. Bowen, and D. Jovanovic, *J. App. Phys.* **81**, 7845 (1997).
- [58] K. Capelle, *cond-mat/0211443*.
- [59] DFT accounts for correlation effects beyond the mean-field. However, in its standard implementations, it is still not suitable to address Coulomb blockade and Kondo physics. This is why the bilinear form of Eq. (2.3) is often naively described as a mean-field approximation, which in the case of DFT is inaccurate.
- [60] C. B. Duke, *Tunneling in Solids*, Suppl. 10, *Solid State Physics*, Ed. by F. Seitz, D. Turnbull, and H. Ehrenreich (Academic Press, New York, 1969) p. 294.
- [61] H. Haug and A.-P. Jauho, *Quantum Kinetics in Transport and Optics of Semiconductors* (Springer, New York, 1996).
- [62] H. Bruus and K. Flensberg, *Many-Body Quantum Theory in Condensed Matter Physics*, (Oxford University Press, 2004).
- [63] D. C. Langreth, on *Linear and Non-Linear Transport in Solids*, ed. by J. T. Devreese and E. Van Dofen (Plenum, New York, 1076).
- [64] J. Rammer and H. Smith, *Rev. Mod. Phys.* **58**, 323 (1986).

- [65] Y. Meir and N. S. Wingreen, Phys. Rev. Lett. **68**, 2512 (1992).
- [66] A.-P. Jauho, N. S. Wingreen, and Y. Meir, Phys. Rev. B **50**, 5528 (1994).
- [67] R. D. Mattuck, *A Guide to Feynman Diagrams in the Many-Body Problem* (Dover, New York, 1992).
- [68] M. P. López Sancho, J. M. López Sancho, and J. Rubio, J. Phys. F **15**, 851 (1985); C. E. T. Gonçalves Dias and B. Koiller, Solid State Commun. **40**, 215 (1981).
- [69] C. Caroli, R. Combescot, P. Nozieres, and D. Saint-James, J. Phys. C **4**, 916 (1971).
- [70] H. M. Pastawski, Phys. Rev. B **44**, 6329 (1991); Phys. Rev. B **46**, 4053 (1992).
- [71] D. S. Fisher and P. A. Lee, Phys. Rev. B **23**, 6851 (1981).
- [72] A. D. Stone and A. Szafer, IBM J. Res. Dev. **32**, 384 (1988).
- [73] H. U. Baranger and A. D. Stone, Phys. Rev. B **40**, 8169 (1989).
- [74] C. Mahaux and H. A. Weidenmuller, *Shell-model Approach to Nuclear Reactions* (North holland, Amsterdam, 1969).
- [75] This is quite reasonable approximation, provided the typical length of the conductor  $L$  is sufficiently long. The same hypothesis is use in molecular electronics [24].
- [76] R. Landauer, in *Nonlinearity in Condensed Matter*, Ed. R. Bishop *et al.*, (Springer, Berlin, 1987).
- [77] Z.-s. Ma, J. Wang, and H. Guo, Phys. Rev. B **57**, 9108 (1998).
- [78] H. Haug and A.-P. Jauho, *Quantum Kinetics in Transport and Optics of Semiconductors* (Springer, New York, 1996).
- [79] M. Büttiker, IBM J. Res. Dev. **32**, 317 (1988).
- [80] I. L. Aleiner, P.W. Brouwer, and L.I. Glazman, Phys. Rep. **358**, 309 (2002).
- [81] L. Onsager, Phys. Rev. **38**, 2265 (1931); H. B. G. Casimir, Rev. Mod. Phys. **17**, 343 (1945).
- [82] M. Büttiker, Phys. Rev. Lett. **57**, 1761 (1986).

- [83] A. D. Benoit, S. Washburn, C. P. Umbach, R. B. Laibowitz, and R. A. Webb, Phys. Rev. Lett. **57**, 1765 (1986).
- [84] A. Yacoby, M. Heiblum, D. Mahalu, and H. Shtrikman, Phys. Rev. Lett. **74**, 4047 (1995); A. Yacoby, R. Schuster, and M. Heiblum, Phys. Rev. B **53**, 9583 (1996).
- [85] A. L. Yeyati and M. Büttiker, Phys. Rev. B **52**, R14 360 (1995).
- [86] I. B. Levinson, Sov. Phys. JETP **68**, 1257 (1989).
- [87] D. Andrieux and P. Gaspard, J. Stat. Mech. P02006 (2007); J. Chem. Phys. **121** 6167 (2004).
- [88] C. Mahaux and H. A. Weidenmüller, *Shell-model Approach to Nuclear Reactions* (North Holland, Amsterdam, 1969).
- [89] We adopt the convention that a trace in an expression involving  $S$ -matrices refers to sums over channels  $a \in \alpha$  and  $b \in \beta$ , whereas traces over Green's functions are taken over the conductor states  $\{\mu\}$ .
- [90] H. Bruus and K. Flensberg, *Many-Body Quantum Theory in Condensed Matter Physics: An Introduction* (Oxford University Press, 2004).
- [91] Y. Gefen, Y. Imry and M. Y. Azbel, Phys. Rev. Lett. **52**, 129 (1984); M. Büttiker, Y. Imry and M. Y. Azbel, Phys. Rev. A **30**, 1982 (1984).
- [92] T. Ando, A. B. Fowler and F. Stern, Rev. Mod. Phys. **54** 437-672 (1982).
- [93] Andreas Fuhrer, Phase Coherence, Orbital and Spin States in Quantum Rings. PhD. Thesis. (2003) Diss. ETH No. 15094.
- [94] Romeo Bianchetti, Magnetic Field Symmetries of Quantum Rings in the Nonlinear Transport Regime. Diploma Thesis in Solid State Physics, ETH Zürich. (2006).
- [95] R. Leturcq, R. Bianchetti, G. Götz, T. Ihn, K. Ensslin, D. C. Driscoll, and A. C. Gossard, Physica E **35**, 327-331 (2006).
- [96] A. Yacoby, M. Heiblum, D. Mahalu and H. Shtrikman, Phys. Rev. Lett. **74**, 4047 (1995); A. Yacoby, R. Schuster and M. Heiblum, Phys. Rev. B **53**, 9583 (1996).
- [97] B. L. Altshuler, A. G. Aronov and B. Z. Spivak, Pis'ma Zh. Eksp. Teor. Fiz. **33**, 101 (1981). JETP Lett. **33**, 94 (1981).