

UNIVERSIDADE FEDERAL DE JUIZ DE FORA
INSTITUTO DE CIÊNCIAS EXATAS
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA

Diego Ferreira Carneiro

Magnetotunelamento numa heteroestrutura de dupla barreira composta por GaAs-AlGaAs

Juiz de Fora
13 de abril de 2016

Diego Ferreira Carneiro

Magnetotunelamento numa heteroestrutura de dupla barreira composta por GaAs-AlGaAs

Tese apresentada ao Programa de Pós-graduação em Física da Universidade Federal de Juiz de Fora, como requisito parcial para obtenção do grau de Doutor.

Orientador: Prof. Dr. Sergio Saul Makler

Juiz de Fora
13 de abril de 2016

AGRADECIMENTOS

Primeiramente à Deus,

Ao prof. Dr. Sérgio S. Makler pela amizade, paciência e grandes ensinamentos.

À minha amada esposa Aline pelo companheirismo e afeto dedicados a mim em todos momentos. Sem seu amor e apoio esse trabalho não seria realizado.

Ao meu amado filho Murilo, que proporciona os momentos mais felizes da minha vida.

Aos meus pais e sogros pelo apoio e carinho.

Ao casal Marcos Cardoso Benhami e Renata Carvalho Ferreira Benhami, por compartilharem comigo uma amizade inestimável e momentos inesquecíveis.

Ao amigo Douglas Martins, pela amizade, parceria e ajuda neste trabalho.

Ao Cefet-MG pelo apoio financeiro

Aos professores do departamento de física da UFJF.

*“Não vos amoldeis às estruturas deste mundo,
mas transformai-vos pela renovação da mente,
a fim de distinguir qual é a vontade de Deus:
o que é bom, o que Lhe é agradável, o que é perfeito”.*
(Bíblia Sagrada, Romanos 12, 2)

RESUMO

Neste trabalho é estudado o tunelamento ressonante numa heteroestrutura de dupla barreira (HDB) considerando a interação elétron-fônon na presença de um campo magnético paralelo à corrente de tunelamento. O dispositivo é uma heteroestrutura na escala nanométrica composta por *GaAs/AlGaAs*. Este é controlado por um potencial externo (bias) e quando os elétrons decaem do estado excitado dentro do poço para o fundamental emitem fônons ópticos primários (LO_1). Tais fônons decaem num par de longitudinais ópticos secundários (LO_2) e transversais acústicos (TA), podendo ser representado por $LO_1 \rightarrow LO_2 + TA$. Os fônons TA produzidos formam um feixe coerente na faixa do terahertz (THz), definindo assim o saser. O sistema pode ser representado pelo hamiltoniano tight-binding que leva em consideração a interação entre elétrons, fônons e elétron-fônon.

A fim de calcular a transmitância e a corrente eletrônica fora do equilíbrio, para uma temperatura finita, utilizaram-se funções de Green retardadas no formalismo de Keldysh. Resolvemos um sistema de equações cinéticas que descreve a dinâmica dos elétrons e fônons no saser. Os fônons TA têm um tempo de vida muito grande e um livre caminho médio que poderia passar de um centímetro. No limite de baixas temperaturas e campos magnéticos fracos, nossos resultados coincidem com os obtidos anteriormente.

No formalismo de Keldysh consideramos os níveis de Landau que, além dos fônons LO_1 , abrem novos canais para fluxo de elétrons no dispositivo. Obtemos os resultados para magnetotunelamento ressonante que estão de acordo com as observações experimentais e estudos teóricos com outros formalismos.

Palavras chaves: Magnetotunelamento, fônons LO .

ABSTRACT

In this work we study the resonant tunneling through a double barrier heterostructure considering the electron-phonon interaction in the presence of a magnetic field parallel to the tunneling current. The device studied here is a heterostructure at the nanoscale composed of GaAs/AlGaAs. It is controlled by an external potential. For a given bias electrons decay from the excited state in the well to the ground state by emitting primary optical phonons (LO_1). That phonons decay into a pair of longitudinal optical (LO_2) and transverse acoustic (TA), being represented by $LO_1 \rightarrow LO_2 + TA$. The TA phonons form a coherent beam produced in the terahertz range (THz), defining the saser. The system was described by a tight-binding Hamiltonian that includes the electrons, the phonons and the electron-phonon interaction.

In order to calculate the transmittance and electron current out of equilibrium at finite temperature, Keldysh Green functions were used. We solve a system of kinetic equations that describes the dynamics of electrons and phonons in the saser. The phonons TA have a very long lifetime and a mean free path that could reach more than one centimeter. In the limit of low temperatures and low magnetic fields our results coincide with those obtained previously

In this Keldysh formalism we consider Landau levels that, besides the LO_1 phonons, opens new channels for the flow of electrons in the device. We obtain the results for resonant magnetotunneling according to the experimental observations and other theoretical studies.

Keywords: Magnetotunneling, phonons LO_1 .

LISTA DE FIGURAS

Figura 1.1	– Esboço da estrutura de bandas de energia para um metal (a) e para um isolante (b). Os estados ocupados estão representados pela cor preta, enquanto que os estados desocupados estão mostrados na tonalidade de cinza claros. As regiões de energia em branco entre cada banda são regiões não permitidas para um elétron.	13
Figura 1.2	– heteroestrutura semicondutora dispostas com GaAs e $Al_xGa_{1-x}As$	16
Figura 1.3	– formação do poço quântico em que são explicitados a energia do elétron e o potencial efetivo como função da direção do crescimento z	17
Figura 1.4	– Banda de condução para uma HDB de AlGaAs/GaAs/AlGaAs,	18
Figura 1.5	– perfis da HDB sob condições de voltagens aplicadas: a) voltagem zero, b) início do tunelamento, c) condição de ressonância e d) logo depois da ressonância	18
Figura 1.6	– Esfera de Fermi de elétrons no emissor	19
Figura 1.7	– Curva característica com interação elétron-fônon	20
Figura 1.8	– a) Esfera de Fermi com quantização ao longo do eixo z sem campo magnético; b) com o campo magnético os discos geram circunferências concêntricas; c) Vista superior das órbitas de Landau para diferentes l	21
Figura 1.9	– Curva característica $I(V)$ para uma HDB composta por GaAs/AlGaAs para diferentes valores de campo magnético paralelos às camadas [Gutiérrez, Porrás-Montenegro e Latgé 2003].	22
Figura 1.10	– Perfil do potencial do dispositivo perto da condição de ressonância	23
Figura 2.1	– Perfil da base da banda de condução em relação às camadas j	28
Figura 2.2	– Corrente de elétrons como função do potencial aplicado. A curva contínua representa o cálculo feito levando em conta a interação fônon-fônon. A linha pontilhada corresponde ao cálculo com $\beta = 0$. Como pode se ver, o efeito da interação fônon-fônon é produzir um pequeno ombro na curva da corrente [Rodrigues 2001]	31
Figura 2.3	– Diagrama da corrente que passa pelo plano j	32
Figura 3.1	– Diagramas de Feynman.	38
Figura 3.2	– a) Diagrama Desconectado b) Diagrama Conectado.	39
Figura 3.3	– Circuito utilizado para o ordenamento temporal da função de Green fora do equilíbrio	43
Figura 3.4	– Circuito usado na definição da função de Green temporalmente ordenada	44
Figura 3.5	– Contorno C_V utilizado no ordenamento temporal da F.G, a fim de que seja possível o uso do teorema de Wick na expansão	46
Figura 3.6	– Deformação do contorno C	47
Figura 4.1	– semicadeia infinita de átomos	51
Figura 4.2	– superfície de contato para o cálculo da função de Green.	52
Figura 4.3	– hopping entre um corpo e a superfície de contato para o cálculo da função de Green.	52
Figura 4.4	– hopping entre um corpo e a superfície de contato para o cálculo da função de Green.	54

Figura 4.5	– Região de dispersão.	55
Figura 4.6	– Reconexão entre os contatos e a região de dispersão.	56
Figura 4.7	– superfícies renormalizadas conectadas.	58
Figura 4.8	– conexão entre a região de espalhamento e as semicadeias.	61
Figura 5.1	– Resultados que mostram picos ressonantes entre níveis de Landau [Boebinger et al. 1990].	69
Figura 5.2	– Transmitância em função da energia onde podem ser vistos picos ressonantes corres- pondentes as transições entre níveis de Landau [Zou, Chao e Galperin 1993]	69
Figura 5.3	– Curva I(V) em que aparecem picos devido às mudanças de níveis de Landau [Eaves, Hayden e Leadbeater 1992].	70
Figura 5.4	– Transições entre os mesmos níveis de Landau.	71
Figura 5.5	– Transições entre níveis de Landau diferentes.	71
Figura 5.6	– Representação da curva de dispersão na HDB	72
Figura 5.7	– Esfera de Fermi do espaço recíproco \mathbf{K} para $\mathbf{B} = 0$	73
Figura 5.8	– Representação da curva de dispersão na HDB para $\mathbf{B} \neq 0$	73
Figura 5.9	– Diagrama de canais independentes	74
Figura 5.10	– Representação da HDB pra o cálculo de funções de Green com interação elétron-fônon	79
Figura 5.11	– Diagrama que representa a HDB, considerando a interação elétron-fônon com a pre- sença do campo magnético	83
Figura 5.12	– Diagrama de fluxo que representa o cálculo auto-cosistente	95
Figura 6.1	– Resultados que mostram a transmitância para diferentes níveis de Landau $p/\hbar\omega_c = 1meV$	97
Figura 6.2	– Resultados que mostram a transmitância para diferentes níveis de Landau $p/\hbar\omega_c = 1.5meV$	98
Figura 6.3	– Resultados que mostram a transmitância para diferentes níveis de Landau $p/\hbar\omega_c = 2meV$	99
Figura 6.4	– Corrente que mostra a contribuição dos diferentes canais sem campo magnético	100
Figura 6.5	– Corrente proveniente da emissão de fônons ($f' = 1$) variando o número de camadas (N_d) do poço.	101
Figura 6.6	– Corrente que mostra a contribuição dos diferentes canais $p/\hbar\omega_c = 1meV$	102
Figura 6.7	– Corrente total para diferentes valores da energia ciclotron.	103
Figura 6.8	– Corrente máxima para diferentes valores de campo magnético.	103
Figura 6.9	– Sistema fora da ressonância. O acúmulo de carga eleva os níveis do poço.	105
Figura 6.10	– Sistema na ressonância	105
Figura 6.11	– Intensidade do saser para diferentes valores de campo magnético para $T \approx 0K$	106
Figura 6.12	– Intensidade do saser para diferentes valores de campo magnético para $T \approx 100K$	107
Figura 6.13	– Intensidade do saser para dupla barreira assimétrica (20/70/11) para $T \approx 0K$	108
Figura 6.14	– Intensidade do saser para dupla barreira assimétrica (20/70/11) para $T \approx 70K$	109
Figura 6.15	– Intensidade do saser para dupla barreira assimétrica (20/70/21) para $B = 1T$	110

LISTA DE TABELAS

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	12
1.1	Semicondutores	12
1.2	Heteroestruturas	14
1.2.1	Heteroestruturas de materiais semicondutores	15
1.2.2	Tunelamento ressonante numa HDB na ausência de campo magnético	16
1.3	Corrente com interação elétron-fônon no tunelamento ressonante, sem campo magnético	19
1.4	Efeito do campo magnético no tunelamento ressonante	21
1.5	Descrição do dispositivo	23
1.6	Aplicações do saser	24
2	MODELO DA HDB SOB O EFEITO DO CAMPO MAGNÉTICO E DA INTERAÇÃO ELÉTRON-FÔNON	25
2.1	Hamiltoniano do sistema	25
2.1.1	Hamiltoniano eletrônico	25
2.1.2	Hamiltoniano fonônico.	28
2.1.3	O hamiltoniano para a interação elétron-fônon	28
2.2	Interação elétron-elétron	29
2.3	Interação fônon-fônon	29
2.4	Corrente eletrônica	31
3	FUNÇÕES DE GREEN	34
3.1	Funções de Green no equilíbrio	34
3.1.1	Temperatura Zero	34
3.1.1.1	Teorema de Wick	37
3.1.1.2	Equação de Dyson	39
3.1.2	Função de Green termodinâmica	40
3.2	Função de Green fora do equilíbrio	42
3.2.1	Prolongamento analítico	47
3.2.2	Formulação de Keldysh	49
4	O TRANSPORTE ELETRÔNICO	51
4.1	Funções de Green das semicadeias e do poço	51
4.2	Expressão da corrente em termos da função de Green	59
4.3	Relação da função de Green com a transmitância	62
4.4	Corrente unidimensional com campo magnético	66

5	MAGNETOTUNELAMENTO	68
5.1	Cálculo das funções de Green com interação elétron-fônon e campo magnético	74
5.2	Cálculo da corrente unidimensional	88
5.3	Equações cinéticas estacionárias	91
5.4	Efeito da acumulação de carga	93
6	RESULTADOS	96
7	CONCLUSÕES	111
	REFERÊNCIAS	113
	APÊNDICE A FÓRMULA DE BOLZ-BANACHIEWICZ E OBTENÇÃO DA MATRIZ M	116

CAPÍTULO 1

INTRODUÇÃO

No início deste trabalho descrevemos de forma direta os conceitos e os efeitos relacionados ao dispositivo estudado nesta tese. Este dispositivo, em analogia ao laser, é denominado saser (Sound Amplification by Stimulated Emission of Radiation).

O saser é um feixe coerente de fônons¹ transversais acústicos (TA) que aparecem devido a emissão de fônons longitudinais ópticos (LO_1), em que estes decaem num par de longitudinais ópticos secundários (LO_2) e transversais acústicos (TA). Os fônons LO_1 são emitidos pelo decaimento de elétrons injetados no primeiro nível excitado de uma heteroestrutura de dupla barreira (HDB) composta, neste caso, por GaAs/AlGaAs.

Quando um potencial externo (bias) é aplicado, torna-se possível sintonizar a HDB a fim de atingir a condição de ressonância, em que a diferença entre o primeiro estado excitado e fundamental do poço quântico seja próxima à energia dos fônons LO_1 , ou seja, $\Delta E \approx \hbar\omega_0$.

O efeito de um campo magnético numa estrutura do tipo HDB quantiza o movimento do elétrons no plano perpendicular à direção do campo. Isto abre novas possibilidades para o tunelamento ressonante dos portadores de carga através do poço quântico que serão discutidas nesta tese.

1.1 Semicondutores

Podemos definir os semicondutores como sólidos que, do ponto de vista da condutividade, possuem poucos elétrons livres na temperatura ambiente. Sua condutividade se encontra numa faixa intermediária entre os metais condutores e os isolantes. Desta forma, quando resolvemos a equação de Schrödinger para um sólido, vemos que a ocupação eletrônica não pode ocorrer para uma energia qualquer, como previsto pela mecânica clássica, mas apenas para

¹ Os fônons são definidos como quasipartículas geradas pela quantização dos modos de vibração de uma rede cristalina

valores que coincidam com as bandas de energia permitidas, veja a figura (1.1).

Quando se chega à temperaturas próximas ao zero absoluto, a ocupação de energia do elétron se dá respeitando o princípio de exclusão de Pauli, começando, assim, da banda de energia mais baixa. Para diferentes tipos de materiais podemos ter duas formas possíveis de ocupação dos elétrons na banda de energia. A primeira ocorre quando a última banda se encontra totalmente preenchida e os elétrons da banda não encontram estados disponíveis para se mover, a menos que adquiram energia a ponto ultrapassarem a região de energia proibida (gap) e atingir o próximo estado vazio. Quando esta for $\sim 4eV$, tal material é dito isolante. Caso o gap seja da ordem de $1eV$ a $2eV$ teremos um semiconductor. A outra forma de ocupação para o elétron ocorre quando a última banda de energia está parcialmente cheia, favorecendo a passagem do elétron para o próximo estado sem que ocorra uma grande mudança de energia. Neste caso o material é condutor.

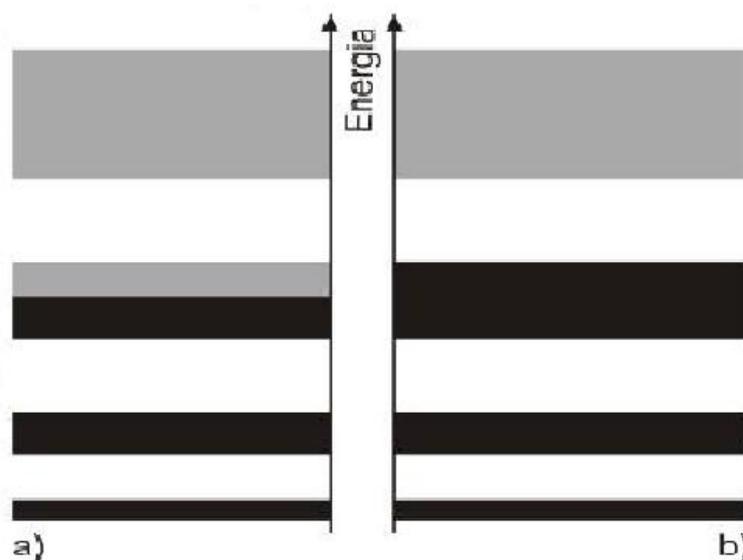


Figura 1.1 – Esboço da estrutura de bandas de energia para um metal (a) e para um isolante (b). Os estados ocupados estão representados pela cor preta, enquanto que os estados desocupados estão mostrados na tonalidade de cinza claros. As regiões de energia em branco entre cada banda são regiões não permitidas para um elétron.

Em um semiconductor transição de um elétron entre a banda de valência e a banda de condução pode ser feita pela aplicação de radiação eletromagnética na ordem do infra-vermelho ou através do acréscimo de temperatura. Ao deixar a banda de menor energia, os elétrons desocupam tal estado e a corrente pode ocorrer na banda de valência, porém, neste caso, o transporte é feito pelos buracos que tem carga positiva. Pode-se aumentar a condutividade de um semiconductor pela adição de elétrons livres ou de buracos diretamente através de alguns tipos de impurezas.

Para efeito de fabricação, os semicondutores mais estudados tem sido os pertencentes a coluna IV da tabela periódica, assim como compostos III-V AlAs, GaAs, GaSb, InP, AlAs;

compostos IV-VI de PbS, PbSe, PbTe; compostos II-VI de CdSe, CdTe e Cu_2S ; compostos ternários $Al_xGa_{1-x}As$ e quaternários. Por apresentarem estruturas cristalinas cúbicas semelhantes (tipo "zinc blende"²), os compostos de GaAs, AlAs e $Al_xGa_{1-x}As$ são os mais encontrados em dispositivos optoeletrônicos. O uso desses compostos gera uma diferença muito pequena entre seus parâmetros de rede e uma pequena concentração de tensões e estados interfaciais.

1.2 Heteroestruturas

Sabe-se que tunelamento quântico de uma partícula numa barreira de potencial de pequenas espessuras não tem análogo clássico. A obtenção de sistemas para investigar este processo tem sido objeto de estudo de muitos pesquisadores. O recente progresso da nanotecnologia permitiu a construção de heteroestruturas semicondutoras, tornando possível a investigação do tunelamento.

As estruturas nanométricas nos permitem analisar os níveis energéticos de poços quânticos através do tunelamento. Neste domínio aparecem as HDBs em diversas aplicações como diodos de tunelamento ressonante (DTR), transistores, osciladores de alta-frequência e este e este, entre outros.

Com esta idéia Chang, Tsu e Esaki [Chang, Esaki e Tsu. 1974], obteve o poço quântico através de multicamadas de Arseneto de Gálio (GaAs) e Arseneto de Gálio Alumínio (AlGaAs). Tal progresso tornou-se possível devido à técnica de crescimento epitaxial de cristais; em especial, MBE ("Molecular-Beam Epitaxy"). O dispositivo consiste em uma heteroestrutura semicondutora com perfil de potencial de dupla barreira de banda de condução ou valência, ou seja, poço quântico (menor "gap") entre duas barreiras (maior "gap"). Com as extremidades deste sistema fortemente dopadas, a transmitância aumenta consideravelmente quando a energia do elétron incidente atinge níveis próximos ao do estado ligado do poço quântico. Tal fenômeno é conhecido como tunelamento ressonante. Este tunelamento é análogo ao interferômetro óptico Fabry-Perot. A fim de controlar os níveis do poço quântico em relação à energia do contato, aplica-se um potencial externo (bias). O início da corrente eletrônica ocorre quando um nível do estado ligado do poço quântico emparelha com o nível de Fermi do emissor e cai abruptamente quando este nível cai abaixo da energia mínima do emissor, isto é, a base da banda de condução do emissor. O gráfico corrente versus bias $I(V)$ contém um pico ressonante e um mínimo denominado vale. Com base nesta curva obtêm-se uma resistência diferencial negativa (RDN), que possibilita inúmeras aplicações em osciladores de alta frequência.

Quando um campo magnético é aplicado na HDB, efeitos quânticos tornam-se muito evidentes devido a quantização das órbitas eletrônicas. O campo magnético aplicado numa direção perpendicular às camadas da barreira gera, nos níveis eletrônicos do emissor, do poço quântico e do coletor, a quantização dos estados em níveis de Landau.

² blenda de zinco

Na ausência de campo magnético, os estados dos elétrons podem ser considerados um sistema 3D e neste caso aparecem oscilações na curva $I(V)$ respeitando a conservação do momento paralelo às camadas. A energia do elétron, no tunelamento ressonante, é quantizada. De forma que as sub-bandas formadas no interior do poço têm energia da forma bidimensional:

$$E_n(\mathbf{k}) = E_n^0 + \frac{\hbar^2(k_x^2 + k_y^2)}{2m^*}, \quad (1.2.1)$$

em que o primeiro termo é o n -ésimo nível de energia e o segundo é o termo cinético do elétron perpendicular à direção do tunelamento com massa efetiva m^* e vetor de onda \mathbf{k} .

Os níveis E_n^0 correspondem aos valores semi-inteiros do comprimento de onda para o elétron no poço. A largura das barreiras permite o tunelamento através delas. O desenvolvimento do formalismo que descreve tal transporte eletrônico foi desenvolvido por Landauer [Landauer 1957] em que a corrente, para potenciais pequenos, é proporcional à transmitância de modos próximos à energia de Fermi [Stone 1991].

$$I = \frac{e^2}{h} TV, \quad (1.2.2)$$

em que I é a corrente no tunelamento, V é o potencial externo e T a transmitância. Como neste trabalho teremos valores maiores para os bias, as funções de Green fora do equilíbrio serão adotadas.

Com o uso das funções de Green de Keldysh, pode-se levar em consideração as interações de muitos corpos como elétron-elétron e elétron-fônon, assim como sistemas físicos fora e dentro do equilíbrio. Assim, para explicar alguns experimentos envolvendo transporte eletrônico, começou-se, a partir da década de 90, utilizar o formalismo de função de Green fora do equilíbrio inicialmente desenvolvido por Keldysh [Keldysh 1965], que permite o cálculo de importantes grandezas físicas como corrente eletrônica, transmitância, condutância etc. Alguns trabalhos como de Anda e Flores [Anda e Flores 1991] e, posteriormente, vários trabalhos [Meir e Wingreen 1992, Bezuglyi e Shumeiko 2015, Guarnieri, Anjos e Makler 2013] sistematizaram de forma concreta o cálculo da corrente com funções de Green fora do equilíbrio, que vem sendo aplicados em diversos regimes de sistemas nanoestruturados.

1.2.1 Heteroestruturas de materiais semicondutores

Pode-se formar heteroestruturas através da deposição de camadas planas na ordem de dezenas de angstroms de largura com diferentes semicondutores. Tais camadas são bem controladas na sua espessura e são superpostas numa dada direção como mostra a figura (1.2). Considerando que os materiais semicondutores são diferentes na sua composição química, estes devem conter redes cristalinas parecidas para que não haja grande diferença nos parâmetros de rede dos semicondutores adjacentes.

O acréscimo dos átomos de alumínio e a correspondente diminuição dos átomos de gálio modifica o potencial atuante nos portadores de carga na direção do crescimento z (gaps diferentes). Desta forma um poço quântico é formado quando um material de menor gap é crescido entre dois materiais de maior gap como mostra a figura (1.3)

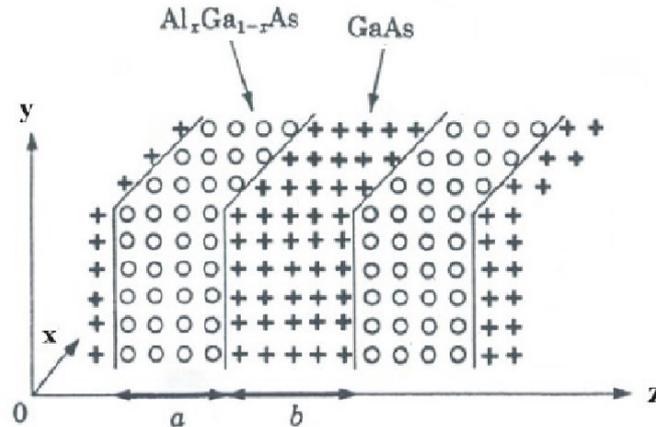


Figura 1.2 – heteroestrutura semicondutora dispostas com GaAs e $Al_xGa_{1-x}As$.

Quando o poço possui uma largura da ordem do comprimento de onda de de Broglie, ocorre um confinamento quântico em que o elétron mantém seu movimento livre no plano perpendicular à direção z formando um conjunto de estados bi-dimensionais. Para achar os estados energéticos nesta estrutura, pode-se usar a equação de Schrödinger para o potencial efetivo:

$$\left[\frac{p^2}{2m_e} + V_{ef,e} \right] \phi_e(\mathbf{r}) = (E_e - E_c) \phi_e(\mathbf{r}), \quad (1.2.3)$$

em que m_e é a massa efetiva do elétron e $V_{ef,e}$ é o potencial efetivo que depende dos tipos de semicondutores, figura (1.3). A solução da equação acima tem a seguinte forma:

$$\phi_e(\mathbf{r}) = e^{ik_x x} \cdot e^{ik_y y} \phi_e(z). \quad (1.2.4)$$

Esta função nos remete ao problema de um poço retangular com níveis localizados dentro do poço, mas que se estendem para dentro das regiões das barreiras.

1.2.2 Tunelamento ressonante numa HDB na ausência de campo magnético

Uma HDB contém camadas semicondutoras fortemente dopadas (contatos) entre duas barreiras de potencial e um poço quântico, sem dopagem. Tais contatos são responsáveis pelo

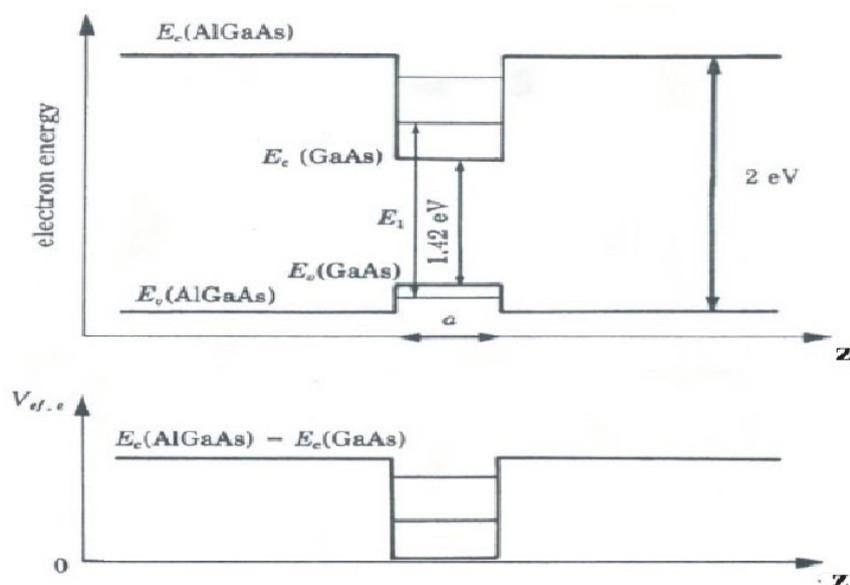


Figura 1.3 – formação do poço quântico em que são explicitados a energia do elétron e o potencial efetivo como função da direção do crescimento z

excesso de elétrons que serão transportados pela HDB quando aplicada uma diferença de potencial nos seus terminais. A alta concentração de dopagem causa um alargamento nos níveis de impurezas do semiconductor, isso desloca o nível de Fermi, que antes se encontrava no interior do gap, para dentro da banda de condução. Isto permite aos portadores de carga se deslocarem na presença do campo elétrico aplicado. Identificamos os contatos como emissor ou coletor, dependendo da polaridade do potencial aplicado à HDB. Desta forma, os portadores de carga do contato 3D tunelam diretamente para o poço 2D e após um certo tempo característico os portadores que se encontram no poço atravessam para o coletor (3D). Desta forma, estados ressonantes são gerados no poço, onde elétrons e buracos permanecem por um tempo. A figura (1.4) representa uma HDB composta por AlGaAs (barreira)/GaAs (poço)/AlGaAs (barreira).

As principais etapas do tunelamento ressonante são apresentadas na figura (1.5) através dos perfis da banda de condução de uma HDB para quatro voltagens diferentes: a) voltagem nula, b) iminência da ressonância, c) em ressonância e d) fora de ressonância. Quando a energia do elétron que flui no emissor coincide com o estado quase-ligado, E_0 , do poço quântico, tem-se o início do tunelamento ressonante figura (1.5b). A voltagem externa aplicada (V) varia os estados ligados do emissor e os estados quase-ligados no poço quântico. No processo de tunelamento ressonante coerente, a energia e o momento paralelo às interfaces das barreiras são conservados, sendo que o tunelamento 3D-2D se caracteriza pelos estados do plano onde ocorre a intersecção $k_z = q_R$ com a esfera de Fermi, em que q_R é o número de onda associado à energia do estado ressonante relativo à banda de condução:

$$q_R = \frac{\sqrt{2m^*(E_0 - E_c^l)}}{\hbar} \quad (1.2.5)$$



Figura 1.4 – Banda de condução para uma HDB de AlGaAs/GaAs/AlGaAs,

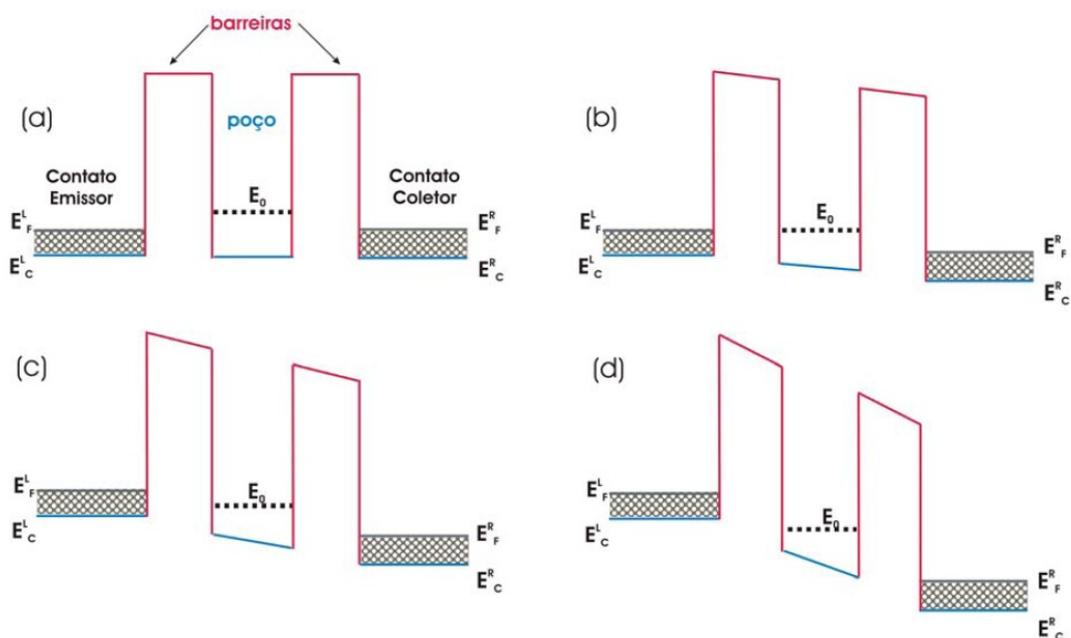


Figura 1.5 – perfis da HDB sob condições de voltagens aplicadas: a) tensão zero, b) início do tunelamento, c) condição de ressonância e d) logo depois da ressonância

em que E_0 é a energia do estado ressonante no poço quântico e E_c^l é a energia do extremo da banda de condução no emissor (fig. (1.6)).

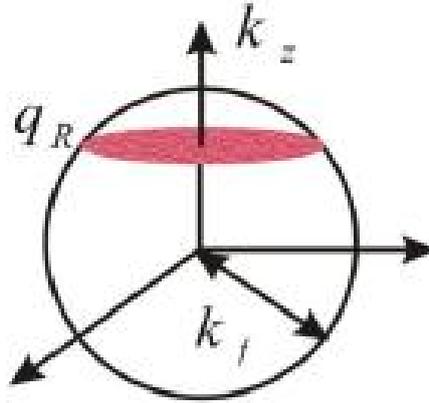


Figura 1.6 – Esfera de Fermi de elétrons no emissor

1.3 Corrente com interação elétron-fônon no tunelamento ressonante, sem campo magnético

A interação entre os átomos de um sólido conduz a propagação de ondas elásticas tanto transversais quanto longitudinais. Caso a temperatura do sólido seja baixa, pequenas oscilações dos átomos ocorrem em torno da posição de equilíbrio e o potencial de interação pode ser aproximado por um termo proporcional ao quadrado dos deslocamentos dos átomos em torno da posição de repouso. Quando este potencial descreve um sólido cristalino, o denominamos de sólido harmônico. Em tais sólidos as ondas elásticas constituem modos normais de vibração. Podemos descrever o hamiltoniano clássico deste sólido como:

$$H = \sum_s \left[\frac{P_s^2}{2m} + \frac{m\omega_s^2 Q_s^2}{2} \right], \quad (1.3.1)$$

onde os P_s são os momentos canonicamente conjugados aos Q_s . Os Q_s representam a expansão de Fourier dos deslocamentos dos átomos em torno da posição de equilíbrio. Eles estão diretamente associado aos modos normais de vibração do sólido.

Do ponto de vista quântico, podemos representar o sólido harmônico como osciladores harmônicos unidimensionais com frequência própria ω_s . A propagação da onda de vetor número de onda \mathbf{k} e modo de vibração α é denotada, para cada oscilador, pelo índice $s = (\mathbf{k}, \alpha)$.

Décadas atrás, vários artigos foram publicados relatando a observação do comportamento do tunelamento ressonante de elétrons através de uma HDB, assim como sua curva característica $I(V)$. Picos satélites foram observados na curva $I(V)$ [Goldman, Tsui e Cunningham 1987] devido ao tunelamento inelástico de elétrons no emissor como mostra a figura (1.7). Este tunelamento é manifestado na curva da transmitância em função da energia, como alarga-

mento das ressonâncias e diminuição da altura da probabilidade de transmissão. A interação elétron-fônon se torna dominante quando consideramos amostras em que é possível desconsiderar efeitos da dispersão devido às impurezas e imperfeições das interfaces. No caso de GaAs e para a liga de AlGaAs os elétrons se acoplam mais fortemente aos fônons LO (Longitudinais ópticos) formando os chamados pólarons [Goldman, Tsui e Cunningham 1987, Goldman, Tsui e Cunningham 1987].

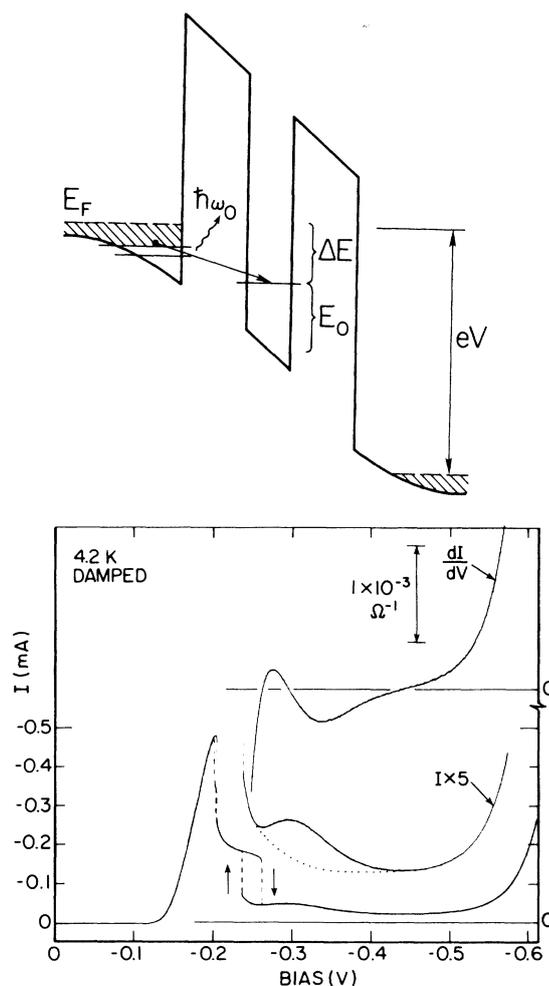


Figura 1.7 – Curva característica com interação elétron-fônon

Os efeitos dos pólarons no tunelamento ressonante de elétrons pode ser visto em muitos trabalhos importantes tanto teóricos quanto experimentais [Goldman, Tsui e Cunningham 1987, Goldman, Tsui e Cunningham 1987, Makler et al. 1994, Makler et al. 1998, Camps et al. 2001, Jonson 1989, Lake, Klimeck e Datta 1993, Popov et al. 2010, Yeranossyan et al. 2015, Kondryuk et al. 2015].

1.4 Efeito do campo magnético no tunelamento ressonante

Quando um campo magnético é aplicado numa região do espaço, o movimento clássico do elétron que ali se encontra é composto por um movimento retilíneo uniforme ao longo do campo e de órbitas circulares perpendiculares ao campo formando uma trajetória helicoidal, de forma que o raio cíclotron $R_c = \frac{mv}{eB}$ e frequência cíclotron $\omega_c = \frac{eB}{m}$ são conhecidos da física clássica.

Em mecânica quântica, o efeito do campo magnético provoca a quantização dos valores da energia do sistema em níveis de Landau, onde as circunferências do caso clássico são substituídas por funções de onda semelhantes as do oscilador harmônico quântico. A quantização do movimento dos elétrons nas direções perpendiculares ao campo magnético é equivalente a um confinamento espacial, isso converte o sistema, que era inicialmente 2D (poço), a um sistema 0D. Como nem sempre o tunelamento é coerente, pois pode ser afetado por processos de espalhamento (impurezas, fônons, defeitos, etc.), não há conservação dos níveis de Landau. Tais processos aumentam a largura de linha dos estados envolvidos, alargando os picos da curva característica I(V).

Os níveis de energia da partícula podem ser dados da seguinte forma:

$$E_l = \hbar\omega_c \left(l + \frac{1}{2} \right) \quad (1.4.1)$$

Impondo $l = 0$ na expressão acima, chega-se que o raio cíclotron da partícula, no primeiro nível de Landau, pode ser escrito como $R_c = \sqrt{\frac{\hbar}{eB}}$. Este valor também é chamado de comprimento magnético $l_B = \sqrt{\frac{\hbar}{eB}}$

A esfera de Fermi no espaço recíproco \mathbf{k} de um sistema bidimensional pode ser vista na figura (1.8).

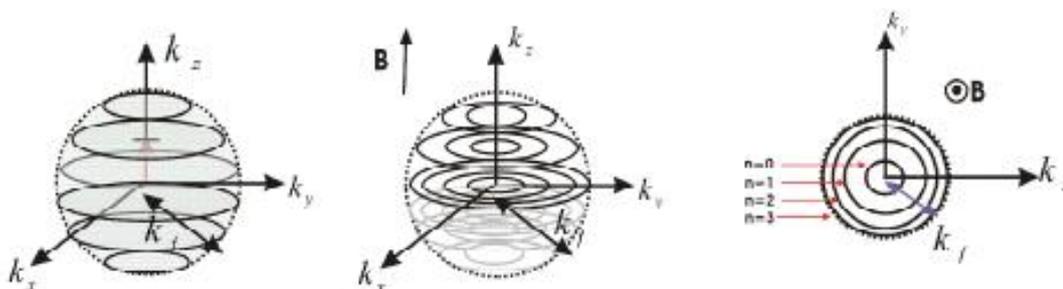


Figura 1.8 – a) Esfera de Fermi com quantização ao longo do eixo z sem campo magnético; b) com o campo magnético os discos geram circunferências concêntricas; c) Vista superior das órbitas de Landau para diferentes l

No caso da HDB, a aplicação do campo magnético paralelo a corrente dos portadores de carga, quantiza o movimento lateral dos elétrons de um gás bidimensional em níveis de Landau,

tanto no emissor quanto no poço quântico com os números quânticos l . O número de estados possíveis por unidade de área, $n = N/S$, em cada nível de Landau totalmente preenchido é dado (no sistema gaussiano) por $n = \frac{eB}{hc}$, em que a degenerescência dos níveis aumenta linearmente com o campo magnético aplicado.

O estudo do comportamento eletrônico na presença de campo magnético intenso a baixas temperaturas tem sido de grande interesse, tanto em estudos teóricos [Zou, Chao e Galperin 1993, Barci 1996, Almansour e Hassen 2014, Popov et al. 2010], quanto experimentais [Boebinger et al. 1990, Gornik et al. 2013, Wang, Yue e Guo 2015, Useinov, Petukhov e Tagirov 2015] e têm como estudo central o transporte eletrônico numa HDB. Em decorrência da interação elétron-fônon no poço, o transporte eletrônico pode ocorrer em diferentes níveis de Landau. Alguns trabalhos [Gutiérrez, Porrás-Montenegro e Latgé 2003, Gutiérrez, Porrás-Montenegro e Latgé 2004, Yan e Liang 2012, Khalil et al. 2012] mostram o comportamento da curva característica $I(V)$ sob a influência de campos magnéticos perpendiculares e paralelos à corrente eletrônica fig.(1.9).

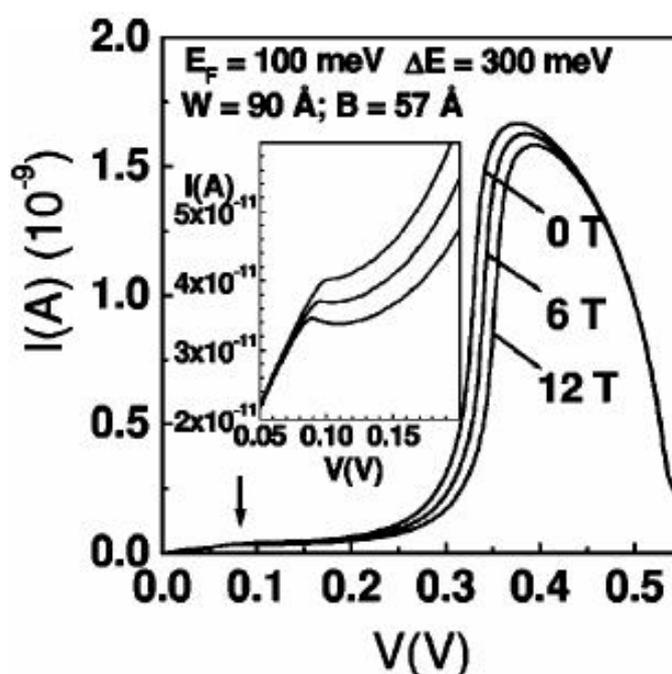


Figura 1.9 – Curva característica $I(V)$ para uma HDB composta por GaAs/AlGaAs para diferentes valores de campo magnético paralelos às camadas [Gutiérrez, Porrás-Montenegro e Latgé 2003].

A presença de campo magnético na direção da corrente permitirá o aparecimento de diferentes picos associados aos níveis de Landau na curva da transmitância $T(E)$.

1.5 Descrição do dispositivo

O dispositivo discutido nesta tese consiste numa HDB composta por *GaAs* e *AlGaAs*. A diferença de energia $\Delta E = E_1 - E_0$ entre o primeiro estado eletrônico excitado E_1 e o estado fundamental E_0 dentro do poço é da ordem da energia $\hbar\omega_0$ dos fônons longitudinais ópticos para potenciais aplicados pequenos, ou seja, $\Delta E \leq \hbar\omega_0$ em que ω_0 é a energia do fônon LO_1 no ponto Γ da zona de Brillouin. Pode-se variar o potencial externo e deixar fixa a energia de Fermi do emissor E_F^l , de forma que os níveis de energia descem no poço, permitindo o fluxo de elétrons quando E_0 cai sob a energia de Fermi e pára, temporariamente, quando E_0 passa por baixo da base da banda de condução do emissor ϵ_0 . A corrente reinicia quando a estado excitado E_1 alcança E_F^l . Com variação do potencial externo pode-se atingir determinados valores de $\Delta E = E_1 - E_0$, em que se estabeleça a condição de ressonância $\epsilon_0 \leq E_1 \leq E_F^l$ e $\Delta E \approx \hbar\omega_0$. Neste ponto os elétrons decaem do primeiro estado excitado para o fundamental emitindo fônons LO_1 . O potencial do dispositivo pode ser visto na figura (1.10).

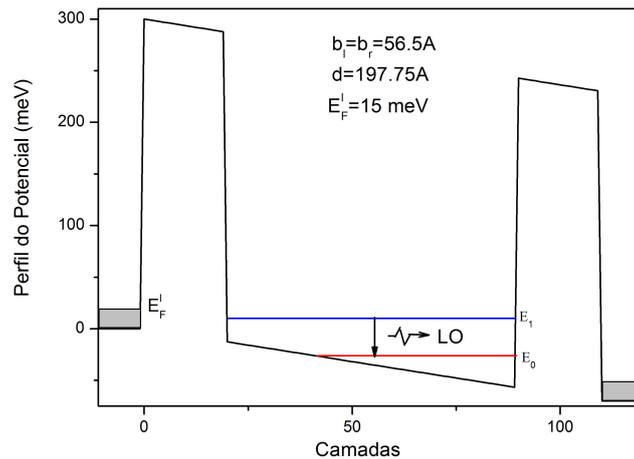


Figura 1.10 – Perfil do potencial do dispositivo perto da condição de ressonância

Quando se dispõe de concentrações de alumínio nas barreiras da ordem de 0.25 [Jusserand et al. 1990] ou 0.30 [Jacob et al. 1994], os fônons gerados estarão confinados no poço podendo ser absorvidos, promovendo o salto dos elétrons de E_0 para E_1 . Juntamente com os processos de absorção e emissão de fônons LO_1 , estes decaem coerentemente por anarmonicidade emitindo fônons TA [Vallée e Bogani 1991]. Assim que o campo de fônons TA estimula o decaimento, novos fônons são gerados em fase com o campo excitante. Os fônons TA secundários podem ser coerentes e formar o feixe que chamamos de saser. O tempo de vida dos fônons TA é grande [Ulbrich et al. 1980] e o livre caminho médio é da ordem de 2mm [Ulbrich et al. 1980]. O feixe de fônons TA produzido fará várias reflexões nas paredes internas da HDB, que fazem um papel de semi-espelhos. Tal comportamento permite a acumulação de fônons TA de vetor de onda $\mathbf{q}_{\parallel} = 0$ paralelo às interfaces. Para um determinado valor de potencial aplicado

V_l , a probabilidade de que sejam emitidos fônons TA com vetor de onda $\mathbf{q}_{\parallel} = 0$ é maior que a soma das probabilidades de se emitir outros modos com $\mathbf{q}_{\parallel} \neq 0$. Desta forma, para valores de potenciais $V > V_l$, o sistema se estabelece de maneira que a emissão ocorra no modo selecionado pela cavidade ressonante (neste caso $\mathbf{q}_{\parallel} = 0$). Assim, pode-se obter um feixe coerente de fônons TA bem definidos.

1.6 Aplicações do saser

Ao longo dos anos, um dos métodos mais conhecidos de se obter imagens acústicas é o ultra-som médico. Neste caso, imagens acústicas são obtidas já que diferentes conteúdos de água nos tecidos produzem diferentes atenuações no feixe (na medicina a frequência é da ordem de 4MHz). Alguns instrumentos comerciais exploram o fato de que o ultra-som pode ser produzido por uma única fonte (um transdutor piezoelétrico) sendo assim uma fonte coerente e podendo produzir hologramas.

Existem equipamentos comerciais para realizar microscopia acústica. Um dos tratamentos mais usados é a microscopia acústica de varredura (Scanning Acoustic Microscopy-SAM), que foi analisado no artigo de revisão [Yu e Boseck 1995], onde pode-se ver a descrição detalhada dos microscópios acústicos de transmissão e reflexão. Foram apresentadas imagens acústicas com resoluções maiores que $0,4\mu m$, obtidas com fônons de 2GHz.

Quando se tem o interesse de obter imagens de nanoestruturas torna-se necessário a aplicação de ondas mais curtas que o tamanho dos detalhes do sistema. O feixe de fônons (TA) proposto pode ter comprimentos de onda $\lambda \sim 25\text{Å}$, que permite analisar detalhes de sistemas da ordem de 50nm. Tal processo seria improvável com a aplicação de luz com comprimento de onda $\lambda \sim 5000\text{Å}$. Em alguns trabalhos já estudam-se os raios X coerentes com comprimento de onda na faixa de 20nm [Chang et al. 1998, Rundquist et al. 1998], mas apesar de se obter imagens com tais raios X, as energias envolvidas são altas ($\sim 0,5keV$) e podem afetar as estruturas estudadas.

O feixe de saser permite o envio de informação entre componentes de um circuito à pequenas distâncias. Isto é possível pois a emissão de fônons do saser pode ser modulada com a intensidade da corrente de entrada, assim, os dispositivos “fonoelétrônicos” trabalhariam com distâncias e energias menores que os permitidos na optoeletrônica, otimizando o desempenho computacional do dispositivo.

CAPÍTULO 2

Modelo da HDB sob o efeito do campo magnético e da interação elétron-fônon

2.1 Hamiltoniano do sistema

O sistema considerado neste trabalho é descrito por um hamiltoniano que contém um termo eletrônico, um fonônico, outro para descrever a interação elétron-fônon, um termo que descreve a interação elétron-elétron e por último um termo que considera a interação fônon-fônon.

$$H_{tot} = H_e + H_f + H_{e-f} + H_{e-e} + H_{f-f} \quad (2.1.1)$$

2.1.1 Hamiltoniano eletrônico

A dinâmica dos elétrons pode ser descrita por um hamiltoniano $3D$ que pode ser reduzido a um $1D$. A presença de um campo magnético externo gera um movimento ciclotrônico nos portadores de cargas e a mecânica quântica prevê orbitais bem definidos para os elétrons. O momento total da partícula será dado pela soma:

$$\mathbf{p} = \mathbf{p}_{linear} + e\mathbf{A} \quad (2.1.2)$$

onde \mathbf{p}_{linear} é o momento cinético e $e\mathbf{A}$ é o momento do campo magnético, em que e é a carga do portador e \mathbf{A} é o potencial vetor tal que $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$.

Representando o momento total pelo operador $\mathbf{p} = -i\hbar\nabla$, pode-se escrever o hamiltoniano para um elétron, num sistema do tipo poço quântico como:

$$\begin{aligned} H_e &= \frac{(\mathbf{p} - e\mathbf{A})^2}{2m^*} + U(z) \\ &= \frac{(-i\hbar\nabla - e\mathbf{A})^2}{2m^*} + U(z) \end{aligned} \quad (2.1.3)$$

onde $U(z)$ é o potencial das barreiras. No calibre de Landau, $\mathbf{A} = (-By, 0, 0)$ é o potencial vetor que caracteriza o campo magnético aplicado na direção z , isto é, $\mathbf{B} = (0, 0, B)$. Em coordenadas cartesianas, podemos expressar o hamiltoniano como:

$$H_e = \frac{1}{2m^*} [(p_x - eA_x)^2 + p_y^2 + p_z^2] + U(z) \quad (2.1.4)$$

Usando a definição do comprimento magnético $\ell_B = \sqrt{\frac{\hbar}{eB}}$ e a frequência de ciclotron $\omega_c = \frac{eB}{m^*}$, chega-se ao hamiltoniano:

$$H_e = \frac{\hbar\omega_c}{2\ell_B^2} \left\{ \left[\frac{\ell_B^2}{i} \frac{\partial}{\partial x} - y \right]^2 - \ell_B^4 \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right\} - \frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + U(z). \quad (2.1.5)$$

Da expressão (2.1.4) vemos que P_x comuta com H_e . Assim, podemos construir um conjunto completo de autovetores comuns à H_e e P_x e que satisfazem à relação tridimensional $H_e \psi = E \psi$. A autofunção $\psi(x, y, z)$ é também autofunção de P_x e separando variáveis temos uma solução da forma:

$$\psi = e^{ik_x x} \theta_l(y) \varphi(z) \quad (2.1.6)$$

e substituindo (2.1.6) em (2.1.5), obtemos para a parte em y ,

$$\frac{\hbar}{2} \omega_c \left[-\ell_B^2 \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \left(\frac{y}{\ell_B} - \ell_B k_x \right)^2 \right] \theta_l(y) = E_l \theta_l(y). \quad (2.1.7)$$

Fazendo a mudança de variáveis $u = \frac{y}{\ell_B} - \ell_B k_x$, temos:

$$\frac{\hbar}{2} \omega_c \left(-\frac{\partial^2}{\partial u^2} + u^2 \right) \theta_l(y) = E_l \theta_l(y). \quad (2.1.8)$$

A expressão (2.1.8) é a equação do oscilador harmônico cujas auto-energias são dadas por $E_l = (l + \frac{1}{2})\hbar\omega_c$. Estes chamamos de níveis de Landau. As energias permitidas para o elétron sob à ação de um campo magnético para potencial $U(z) = 0$, são:

$$E = E_l + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m^*} = (l + \frac{1}{2})\hbar\omega_c + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m^*} \quad (2.1.9)$$

A expressão (2.1.9) mostra que o campo magnético quantiza o movimento do elétron no plano xy perpendicular à direção em que está sendo aplicado.

Para a solução (2.1.6), temos a seguinte equação unidimensional em z :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2}{dz^2} + U(z) + E_l \right] \varphi(z) = E \varphi(z) \quad (2.1.10)$$

A fim de resolver (2.1.10) fazemos a aproximação de ligações fortes.

$$\varphi(z) = \sum_{j=1}^{\infty} c_j \Psi_j(z) \quad (2.1.11)$$

onde c_j são coeficientes e $\Psi_j(z)$ são estados de Wannier. Os elementos de matriz do hamiltoniano abaixo podem ser calculados.

$$H_e = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2}{dz^2} + U(z) + E_l \quad (2.1.12)$$

Aplicando (2.1.11) e (2.1.12) em (2.1.10) temos

$$\left\langle \sum_{i=1}^{\infty} c_i \Psi_i(z) \middle| H_e \right\rangle \sum_{j=1}^{\infty} c_j \Psi_j(z) = \left\langle \sum_{i=1}^{\infty} c_i \Psi_i(z) \middle| E \right\rangle \sum_{j=1}^{\infty} c_j \Psi_j(z), \quad (2.1.13)$$

que, retornando a soma sobre níveis de Landau, resulta em:

$$\sum_{j,l} (\varepsilon_j + E_l - 2v) c_{j,l}^* c_{j,l} + v(c_{j,l}^* c_{j+1,l} + c_{j+1,l}^* c_{j,l}) = E \sum_{j,l} c_{j,l}^* c_{j,l} \quad (2.1.14)$$

onde o hopping v é definido como

$$v = -\frac{\hbar^2}{2m^* a^2} \quad (2.1.15)$$

e a é a distância entre camadas. Pode-se escrever a expressão (2.1.14) em segunda quantização se definirmos o hamiltoniano

$$H_e = \sum_{j,l} (\varepsilon_j + E_l - 2v) c_{j,l}^\dagger c_{j,l} + v(c_{j,l}^\dagger c_{j+1,l} + c_{j+1,l}^\dagger c_{j,l}) \quad (2.1.16)$$

sendo $c_{j,l}^\dagger$, e $c_{j,l}$ os operadores de criação e aniquilação de um elétron no sítio j e nível de Landau l com uma soma implícita nos spins σ . Esta representação é interessante para tratar problemas de muitos corpos, por exemplo a interação elétron-fônon. Podemos definir $\varepsilon'_j = \varepsilon_j - 2v$, onde ε_j descreve o perfil do potencial da HDB na direção $z = ja$, representado pelo gráfico na figura (2.1). A origem do sistema ($j = 0$) se localiza na interface entre a semicadeia à esquerda e a barreira. Assim, para $j < 0$, tem-se $\varepsilon_j = 0$ e para $j \geq N$, tem-se $\varepsilon_j = -U$. Então, o hamiltoniano para os elétrons resulta em:

$$H_e = \sum_{j,l} (\varepsilon'_j + E_l) c_{j,l}^\dagger c_{j,l} + v_j (c_{j,l}^\dagger c_{j+1,l} + c_{j+1,l}^\dagger c_{j,l}). \quad (2.1.17)$$

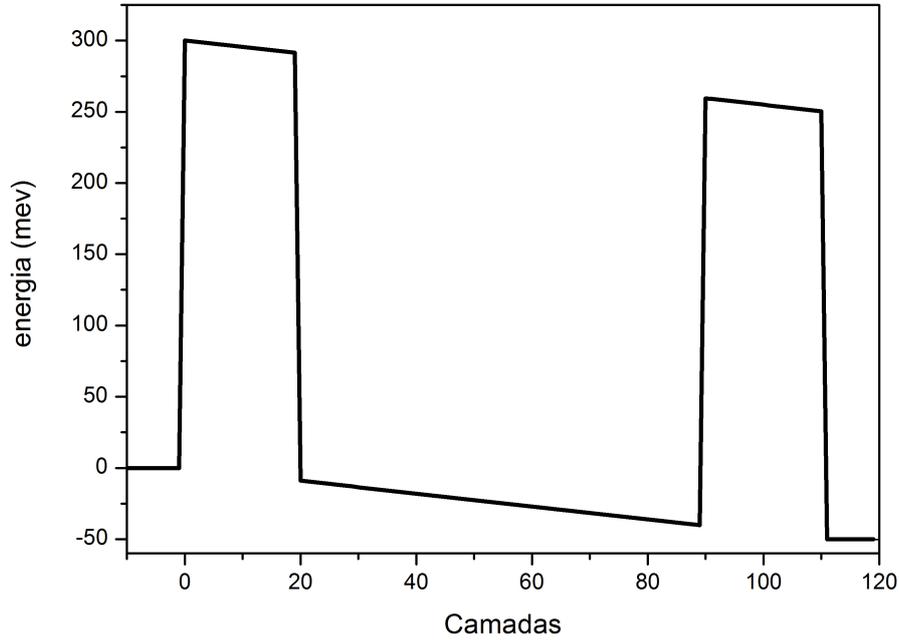


Figura 2.1 – Perfil da base da banda de condução em relação às camadas j .

2.1.2 Hamiltoniano fonônico.

Como foi dito no capítulo 1, a interação dominante no GaAs é o acoplamento dos elétrons com os fônons LO_1 . O tempo de permanência dos elétrons no poço é muito grande, ou seja, proporcional ao inverso da largura do pico ressonante, $\tau \sim \hbar/\Gamma$, de modo que a probabilidade de emitir um fônon quando o elétron está dentro do poço é muito maior. Em trabalhos com HDB de $AlGaAs/GaAs$ numa concentração de Al maior que 0.3, os fônons estão confinados dentro do poço [Jusserand et al. 1990]. O hamiltoniano mais simples, que corresponde a um único modo de vibração de frequência ω_0 , será:

$$H_f = \hbar\omega_0 b^\dagger b \quad (2.1.18)$$

onde $\hbar\omega_0 = 36,6\text{meV}$ e b^\dagger , b são os operadores criação e aniquilação de fônons LO_1 .

2.1.3 O hamiltoniano para a interação elétron-fônon

No problema do magnetotunelamento assistido por fônons, temos o hamiltoniano de Fröhlich [Zou, Chao e Galperin 1993]

$$H_{e-f} = \sum_{q,l,l'} \frac{M_0}{\sqrt{V_0 q}} \langle l' | e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} | l \rangle (b_q c_{l',l}^\dagger c_{0',l} + b_q^\dagger c_{0',l}^\dagger c_{l',l}) \quad (2.1.19)$$

em que l e l' são os índices de Landau. Para apenas um modo de vibração dentro do poço (2.1.19) fica

$$H_{e-f} = \sum_{l',l} \lambda_{l'l} (b_q c_{1',l'}^\dagger c_{0',l} + b_q^\dagger c_{0',l'} c_{1',l}) \quad (2.1.20)$$

onde

$$\lambda_{l'l} = \frac{M_0}{\sqrt{V_0 q}} \langle l' | e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} | l \rangle \quad (2.1.21)$$

com

$$M_0 = \frac{4\pi\alpha\hbar(\hbar\omega_0)^{3/2}}{(2m^*)^{1/2}} \quad (2.1.22)$$

e

$$\alpha = \frac{e^2}{\hbar} \left(\frac{m^*}{2\hbar\omega_0} \right)^{1/2} \left(\frac{1}{\epsilon_\infty} - \frac{1}{\epsilon_0} \right) \quad (2.1.23)$$

é a constante de Fröhlich para o volume.

2.2 Interação elétron-elétron

O hamiltoniano H_{e-e} que descreve a interação elétron-elétron é feita na aproximação de Hartree. Isto significa que as energias E_1 e E_0 , que dependem da carga acumulada no poço, é tratado auto-consistentemente. Esta metodologia será vista com detalhe na seção (5.4). Devido a carga acumulada no poço, a interação elétron-elétron são tratadas no sistema. Tais oscilações só ocorrem no limiar da emissão dos fônons. As características dessas oscilação foram assunto de outro trabalho [Weberszpil 1997].

2.3 Interação fônon-fônon

O decaimento dos fônons num cristal é devido tanto as anarmonicidades intrínsecas da rede quanto à desordem da mesma. Em cristais com boa qualidade cristalina, a dispersão dos fônons por impurezas e defeitos espaciais é desprezível. Produto disso, o principal mecanismo de dispersão dos fônons é devido a interação fônon-fônon causada pelas anarmonicidades do potencial cristalino.

O termo anarmônico de menor ordem no potencial cristalino é o de terceira ordem

$$H_{f-f} = \frac{1}{3!} \sum_{s_1, s_2, s_3} \sum_{\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, \mathbf{q}_3} V_{s_1, s_2, s_3}^{(3)}(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, \mathbf{q}_3) A_{s_1, \mathbf{q}_1} A_{s_2, \mathbf{q}_2} A_{s_3, \mathbf{q}_3}, \quad (2.3.1)$$

onde $V_{s_1, s_2, s_3}^{(3)}$ é o coeficiente cúbico de acoplamento anarmônico e $A_{s, \mathbf{q}} = b_{s, \mathbf{q}} + b_{s, -\mathbf{q}}^\dagger$ é a amplitude da vibração do fônon no ramo s com vetor de onda \mathbf{q} . O produto das amplitudes $A_{s, \mathbf{q}}$ dá

lugar a oito termos. Um desses termos é $b_{s_1, -\mathbf{q}_1} b_{s_2, -\mathbf{q}_2} b_{s_3, \mathbf{q}_3}^\dagger$ e representa a criação de um fônon com momento \mathbf{q}_3 no ramo s_3 devido a aniquilação de dois fônons, um com momento $-\mathbf{q}_1$ no ramo s_1 e outro com momento $-\mathbf{q}_2$ no ramo s_2 . Todos esses processos têm que cumprir com a conservação do momento cristalino e da energia.

O coeficiente $V_{s_1, s_2, s_3}^{(3)}$ pode ser escrito como [Ziman 1972]:

$$V_{s_1, s_2, s_3}^{(3)} = \left(\frac{\hbar^3}{8V_r M^3} \right)^{1/2} \frac{|q_1 q_2 q_3|}{(v_1 v_2 v_3)^{1/2}} \xi \quad (2.3.2)$$

onde $V_r = \frac{Sd}{a^3}$, M é a massa iônica reduzida, v_i e q_i são a frequência e o módulo do vetor de onda do modo s_i ($i = 1, 2, 3$), e ξ é uma constante que depende das propriedades elásticas do material.

O processo mais provável de ocorrer no GaAs é o decaimento de um fônon longitudinal óptico LO_1 (modo q_1) em outro modo longitudinal óptico LO_2 (modo q_2) e em um transversal acústico TA (modo q_3). Desta maneira, dos termos que aparecem no somatório da expressão (2.3.1), somente dois deles são de interesse. O Hamiltoniano (2.3.1) pode ser escrito, em segunda quantização, da seguinte forma:

$$H_{f-f} = \beta \sum_{\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, \mathbf{q}_3} b_{\mathbf{q}_1}^\dagger b_{\mathbf{q}_2} b_{\mathbf{q}_3} + b_{\mathbf{q}_1} b_{\mathbf{q}_2}^\dagger b_{\mathbf{q}_3}^\dagger, \quad (2.3.3)$$

onde β é o coeficiente que descreve a interação fônon-fônon dado por:

$$\beta = \langle f | H_{f-f} | i \rangle = V_{s_1, s_2, s_3}^{(3)} = \left(\frac{\hbar^3}{8V_r M^3} \right)^{1/2} \frac{|q_1 q_2 q_3|}{(v_1 v_2 v_3)^{1/2}} \xi. \quad (2.3.4)$$

O parâmetro β pode ser calculado usando o resultado experimental para a taxa de emissão de fônons τ da referência [Vallée e Bogani 1991].

A taxa de emissão de fônons pode ser calculada pela seguinte expressão:

$$\frac{1}{\tau} = \frac{2\pi}{\hbar} \delta(E_i - E_f) |\langle f | H_{f-f} | i \rangle|^2. \quad (2.3.5)$$

Usando o Hamiltoniano (2.3.3) e integrando sobre todas as energias possíveis chegamos à:

$$\frac{1}{\tau} = \frac{2\pi}{\hbar} \frac{1}{\hbar \omega_0} \left[\left(\frac{\hbar^3}{8V_r M^3} \right)^{1/2} \frac{|q_1 q_2 q_3|}{(v_1 v_2 v_3)^{1/2}} \xi \right]^2. \quad (2.3.6)$$

Substituindo a expressão (2.3.4) em (2.3.6) chegamos à seguinte relação para β :

$$\beta = \left(\frac{\hbar^2 \omega_0}{2\pi \tau} \right)^{1/2}, \quad (2.3.7)$$

Substituindo τ pelo valor experimental $\tau = 9.09 ps$ [Vallée e Bogani 1991], obtemos que $\beta = 0.65 meV$

Nesta tese não consideramos a interação fônon-fônon no cálculo da corrente eletrônica, já que esta interação provoca apenas um pequeno “ombro” na curva característica I(V) da HDB estudada, como pode ser visto na figura (2.2)

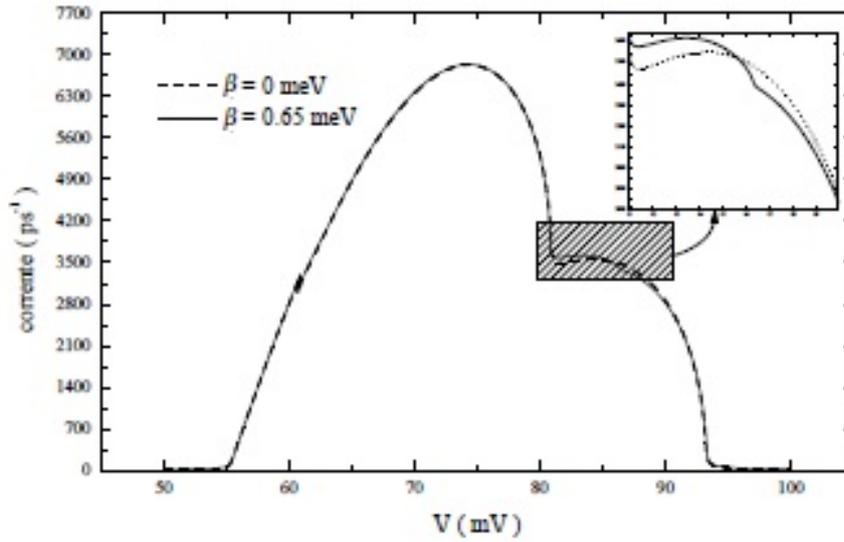


Figura 2.2 – Corrente de elétrons como função do potencial aplicado. A curva contínua representa o cálculo feito levando em conta a interação fônon-fônon. A linha pontilhada corresponde-se ao cálculo com $\beta = 0$. Como pode se ver, o efeito da interação fônon-fônon é produzir um pequeno ombro na curva da corrente [Rodrigues 2001]

2.4 Corrente eletrônica

No formalismo de ligações fortes, consideremos um portador no sítio j cuja carga é definida por:

$$q_j = ec_j^\dagger c_j. \quad (2.4.1)$$

Para o hamiltoniano total (2.1.1), a comutação $[c_j^\dagger c_j, H] = [c_j^\dagger c_j, H_e]$, pois $[c_j^\dagger c_j, H_f] = 0$ e $[c_j^\dagger c_j, H_{e-f}] = 0$ nas regiões fora da dupla barreira $j < 0$ e $j \geq N$. Novamente supomos nulos os termos fonônicos fora do poço quântico.

Para um dado operador $\hat{\mathbf{O}}$, a sua dinâmica é descrita pela equação de movimento

$$i\hbar \frac{d\hat{\mathbf{O}}}{dt} = [\hat{\mathbf{O}}, \hat{H}]. \quad (2.4.2)$$

A partir de (2.4.1), podemos escrever a taxa de variação de carga no plano j por

$$i\hbar \frac{dq_j}{dt} = e \left[c_j^\dagger \left(i\hbar \frac{dc_j}{dt} \right) + \left(i\hbar \frac{dc_j^\dagger}{dt} \right) c_j \right] \quad (2.4.3)$$

e, nas regiões $j < 0$ e $j \geq N$, a equação de movimento do operador de aniquilação é dada por:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{dc_j}{dt} &= c_j \hat{H}_e - \hat{H}_e c_j \\ &= \epsilon_j' c_j + v(c_{j-1} + c_{j+1}) \end{aligned} \quad (2.4.4)$$

onde foram usadas (2.1.17) e as relações de anticomutação dos elétrons

$$\begin{aligned} \{c_j^\dagger, c_{j'}\} &= \delta_{j,j'}, \\ \{c_j, c_{j'}\} &= 0, \\ \{c_j^\dagger, c_{j'}^\dagger\} &= 0. \end{aligned} \quad (2.4.5)$$

A conjugada de (2.4.4) fica

$$-i\hbar \frac{dc_j^\dagger}{dt} = \varepsilon_j' c_j^\dagger + v(c_{j-1}^\dagger + c_{j+1}^\dagger). \quad (2.4.6)$$

Substituindo (2.4.6) e (2.4.4) em (2.4.3), chegamos

$$\begin{aligned} \frac{dq_j}{dt} &= \frac{ev}{i\hbar} \left[(c_j^\dagger c_{j-1} - c_{j-1}^\dagger c_j) - (c_{j+1}^\dagger c_j - c_j^\dagger c_{j+1}) \right] \\ &= I_{j-1/2} - I_{j+1/2}, \end{aligned} \quad (2.4.7)$$

em que

$$I_{j-1/2} = \frac{ev}{i\hbar} (c_j^\dagger c_{j-1} - c_{j-1}^\dagger c_j). \quad (2.4.8)$$

e

$$I_{j+1/2} = \frac{ev}{i\hbar} (c_{j+1}^\dagger c_j - c_j^\dagger c_{j+1}) \quad (2.4.9)$$

A expressão (2.4.7), escrita em termos dos operadores criação e aniquilação pode ser representada pelo diagrama (2.3). A expressão (2.4.8) representa o balanço líquido de carga entre os sítios $j-1$ e j e a expressão (2.4.9) representa o balanço líquido de carga entre os sítios j e $j+1$.

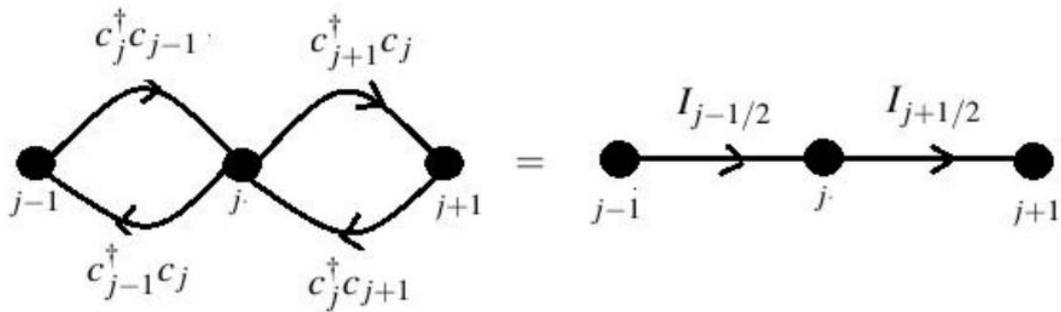


Figura 2.3 – Diagrama da corrente que passa pelo plano j .

No estado estacionário a corrente independe do sítio sobre o qual é medido, então omitiremos o índice $j-1/2$. Desta forma, escreve-se a corrente, para uma temperatura finita em um potencial externo, como a média da expressão (2.4.8).

$$\bar{I} = \langle I \rangle = \frac{ev}{i\hbar} \left[\langle c_j^\dagger c_{j-1} \rangle - \langle c_{j-1}^\dagger c_j \rangle \right]. \quad (2.4.10)$$

O termo $\langle c_j^\dagger c_{j-1} \rangle$ representa o número médio de elétrons que saltam do sítio $j-1$ para j e o termo $\langle c_{j-1}^\dagger c_j \rangle$ representa o número médio de elétrons que saltam do sítio j para $j-1$. A corrente média \bar{I} calcula o balanço de carga do sítio $j-1$ para j e vice-versa.

Este trabalho trata de um sistema fora do equilíbrio, já que um potencial externo é aplicado. A fim de calcular a corrente eletrônica, introduziremos, no próximo capítulo, as funções de Green no formalismo de Keldysh. Isto permite o cálculo da corrente média (2.4.10) na HDB a uma temperatura finita.

CAPÍTULO 3

Funções de Green

Na física clássica, as funções de Green podem ser usadas a fim de resolver uma equação diferencial não-homogênea. Tais funções tornam possível o cálculo de importantes grandezas físicas associadas à sistemas de muitos corpos, tanto no equilíbrio térmico quanto fora do equilíbrio, tais como corrente eletrônica, transmitância, condutância etc.

3.1 Funções de Green no equilíbrio

3.1.1 Temperatura Zero

Um sistema de muitos corpos à temperatura igual a zero é frequentemente estudado, embora os sistemas experimentais reais nunca estejam à temperatura igual a zero¹. Desta forma, cálculos à temperatura zero são úteis para descrever sistemas reais, além de nos fornecer características das interações do sistema no estado fundamental.

Primeiramente, vamos descrever uma partícula pelo operador de campo $\psi(\mathbf{x})$ da seguinte maneira:

$$\psi(\mathbf{x}) = \sum_k u_k(\mathbf{x})c_k,$$

$$\psi^\dagger(\mathbf{x}) = \sum_k u_k^*(\mathbf{x})c_k^\dagger$$

em que c_k aniquila a partícula no estado k e c_k^\dagger cria a partícula no estado k . Os operadores $\psi(\mathbf{x})$ e $\psi^\dagger(\mathbf{x})$ atuam no espaço de Hilbert desde que escritos na segunda quantização. As funções de onda $u_k(\mathbf{x})$ formam um conjunto completo de auto-funções com número quântico k . Utilizando

¹ Isto pode ser feito quando, por exemplo, a temperatura em que são estudadas e medidas as propriedades é muito menor que a temperatura relevante no caso (por exemplo a temperatura de Fermi T_F .)

as relações de anticomutação para férmions (2.4.5), podemos escrever, para os operadores de campo:

$$\begin{aligned}\{\psi^\dagger(\mathbf{x}), \psi(\mathbf{x}')\} &= \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}'), \\ \{\psi(\mathbf{x}), \psi(\mathbf{x}')\} &= 0, \\ \{\psi^\dagger(\mathbf{x}), \psi^\dagger(\mathbf{x}')\} &= 0,\end{aligned}\tag{3.1.1}$$

As Funções de Green dos elétrons à temperatura zero são definidas da seguinte maneira:

$$G(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}', t') = -\frac{i}{\hbar} \frac{\langle \Psi_0 | T \psi_h(\mathbf{x}, t) \psi_h^\dagger(\mathbf{x}', t') | \Psi_0 \rangle}{\langle \Psi_0 | \Psi_0 \rangle}\tag{3.1.2}$$

onde $|\Psi_0\rangle$ representa o estado fundamental do sistema interagente $H|\Psi_0\rangle = E_0|\Psi_0\rangle$. O Hamiltoniano do sistema

$$H = H_0 + V\tag{3.1.3}$$

é a soma da parte solúvel H_0 e V é termo da interação. O índice h denota o operador na representação de Heisenberg

$$\psi_h(t) = e^{iHt/\hbar} \psi(0) e^{-iHt/\hbar}$$

e T é o operador ordenamento temporal definido da seguinte forma:

$$TA(t)B(t') = \theta(t - t')A(t)B(t') - \theta(t' - t)B(t')A(t).\tag{3.1.4}$$

Se diferenciarmos a função de Green da eq.(3.1.2), lembrando que $\frac{\partial \theta(t-t')}{\partial t} = \delta(t-t')$ e $\frac{\partial \theta(t'-t)}{\partial t} = -\delta(t-t')$ e usando a relação (3.1.4), chegamos na seguinte equação de movimento:

$$\begin{aligned}i\hbar \frac{\partial G(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}', t')}{\partial t} &= \delta(t - t') \frac{\langle \Psi_0 | \{ \psi_h(\mathbf{x}, t), \psi_h^\dagger(\mathbf{x}', t) \} | \Psi_0 \rangle}{\langle \Psi_0 | \Psi_0 \rangle} - \\ &- \frac{i}{\hbar} \frac{\langle \Psi_0 | T i\hbar \frac{\partial \psi_h(\mathbf{x}, t)}{\partial t} \psi_h^\dagger(\mathbf{x}', t') | \Psi_0 \rangle}{\langle \Psi_0 | \Psi_0 \rangle}.\end{aligned}\tag{3.1.5}$$

Voltando a relação (3.1.1), o primeiro termo depois da igualdade da equação acima é simplesmente uma multiplicação de funções delta $\delta(t - t')\delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}')$. Já no segundo termo depois da igualdade calculamos $\frac{\partial \psi_h(\mathbf{x}, t)}{\partial t}$.

Para partículas livres, em que o hamiltoniano é

$$H = \frac{-\hbar^2}{2m} \int \psi^\dagger(\mathbf{x}) \nabla^2 \psi(\mathbf{x}) dx$$

temos a equação de movimento de Heisenberg:

$$i\hbar \frac{\partial \psi_h(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = [\psi_h(\mathbf{x}, t), H] = \frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi_h(\mathbf{x}, t).\tag{3.1.6}$$

De (3.1.5), a função de Green livre G_0 obedece a equação de Schrödinger:

$$\left[i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \right] G_0(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}', t') = \hbar \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \delta(t - t') \quad (3.1.7)$$

Ao mudar da representação de Heisenberg para a representação de interação e usando o teorema de Gell Mann e Low [Mahan 1990], que conecta o estado fundamental de H_0 , da eq.(3.1.3), denotado por: $|\Phi_0\rangle$, ao estado fundamental de H , denotado por: $|\Psi_0\rangle$, chegamos numa nova relação para a função de Green:

$$G(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}', t') = -i \frac{\langle \Phi_0 | T S(\infty, -\infty) \hat{\psi}(x, t) \hat{\psi}^\dagger(x', t') | \Phi_0 \rangle}{\langle \Phi_0 | S(\infty, -\infty) | \Phi_0 \rangle} \quad (3.1.8)$$

em que são conhecidos os termos nele contidos e ocasionalmente adotamos $\hbar = 1$. A matriz S pode ser representada por:

$$S(t, t') = T \left[\exp \left(-i \int_{t'}^t dt_1 \hat{V}(t_1) \right) \right], \quad (3.1.9)$$

e $\hat{\psi}(t)$ foi calculado na representação de interação,

$$\begin{aligned} \hat{\psi}(t) &= U(t) \psi(0), \\ U(t) &= e^{iH_0 t} e^{-iHt}. \end{aligned} \quad (3.1.10)$$

A função de Green também pode ser definida para o caso especial em que não existe interações ($V = 0$), sendo nesse caso a matriz S , dada pela expressão (3.1.9), igual a identidade. Esta função de Green desempenha um papel especial no formalismo e podemos designá-la por G_0 :

$$G_0(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}', t') = -i \langle \Phi_0 | T \hat{\psi}(x, t) \hat{\psi}^\dagger(x', t') | \Phi_0 \rangle. \quad (3.1.11)$$

G_0 é chamada de função de Green não-perturbada ou, as vezes, de propagador livre.

Podemos escrever a função de Green (3.1.8) em termos do momento \mathbf{p} , simplesmente fazendo a seguinte transformada de Fourier:

$$G(\mathbf{p}, t - t') = \int_{-\infty}^{\infty} d^3 \mathbf{x} e^{-i\mathbf{p} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}')} G(\mathbf{x} - \mathbf{x}', t - t'). \quad (3.1.12)$$

As funções de Green para fônons são definidas na representação de interação como:

$$D(\mathbf{q}, t - t') = \frac{-i \langle \Phi_0 | T \hat{A}_{\mathbf{q}}(t) \hat{A}_{-\mathbf{q}}(t') S(\infty, -\infty) | \Phi_0 \rangle}{\langle \Phi_0 | S(\infty, -\infty) | \Phi_0 \rangle}, \quad (3.1.13)$$

em que

$$\hat{A}_{-\mathbf{q}}(t) = e^{iH_0 t} A_{-\mathbf{q}} e^{-iH_0 t},$$

no qual

$$A_{\mathbf{q}} = a_{\mathbf{q}} + a_{-\mathbf{q}}^\dagger.$$

Por definição $a_{-\mathbf{q}}^\dagger$ é o operador de criação do fônon com momento $-\mathbf{q}$ e $a_{\mathbf{q}}$ é o operador de destruição do fônon com momento \mathbf{q} .

3.1.1.1 Teorema de Wick

A função de Green definida em (3.1.12) pode ser calculada a partir da expansão de $S(-\infty, \infty)$ do numerador, de forma que:

$$G(\mathbf{p}, t - t') = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-i)^{n+1}}{n!} \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \dots \int_{-\infty}^{\infty} dt_n \frac{\langle \Phi_0 | T \hat{\psi}_{\mathbf{p}}(t) \hat{V}(t_1) \dots \hat{V}(t_n) \hat{\psi}_{\mathbf{p}}^{\dagger}(t') | \Phi_0 \rangle}{\langle \Phi_0 | S(\infty, -\infty) | \Phi_0 \rangle}. \quad (3.1.14)$$

onde a soma inclui apenas diagramas topológicos conectados e diferentes [Mahan 1990]. No primeiro momento, será ignorado o fator no denominador $\langle \Phi_0 | S(\infty, -\infty) | \Phi_0 \rangle$. O objetivo imediato é aprender a calcular o ordenamento temporal dos operadores que estão dentro do ‘bra’ e ‘ket’ do numerador. Supondo-se que o operador $\hat{V}(t)$ seja composto por n operadores de criação e n operadores de destruição para que a média seja diferente de zero. A tarefa de se calcular os termos do numerador da eq.(3.1.14) é árdua, pois existem várias maneiras de se ordenar temporalmente e emparelhar os operadores de criação e destruição. Apesar da grande quantidade de ordenações possíveis entre operadores, apenas um número pequeno dessas combinações são fisicamente interessantes. Assim o objetivo é selecionar, de uma forma simples, os termos fisicamente relevantes, os quais são conseguidos com a ajuda de alguns teoremas que simplificam os procedimentos. O primeiro deles é o teorema de Wick que determina que sejam feitos todos os emparelhamentos possíveis entre os operadores de criação e destruição com a ordenação temporal adequada. Por exemplo:

$$\begin{aligned} \langle \Phi_0 | T \hat{\psi}_{\alpha}(t) \hat{\psi}_{\beta}^{\dagger}(t_1) \hat{\psi}_{\gamma}(t_2) \hat{\psi}_{\delta}^{\dagger}(t') | \Phi_0 \rangle &= \langle \Phi_0 | T \hat{\psi}_{\alpha}(t) \hat{\psi}_{\beta}^{\dagger}(t_1) | \Phi_0 \rangle \langle \Phi_0 | T \hat{\psi}_{\gamma}(t_2) \hat{\psi}_{\delta}^{\dagger}(t') | \Phi_0 \rangle \\ &- \langle \Phi_0 | T \hat{\psi}_{\alpha}(t) \hat{\psi}_{\delta}^{\dagger}(t') | \Phi_0 \rangle \langle \Phi_0 | T \hat{\psi}_{\gamma}(t_2) \hat{\psi}_{\beta}^{\dagger}(t_1) | \Phi_0 \rangle. \end{aligned} \quad (3.1.15)$$

Observe-se que existe um operador de ordenamento temporal T em cada emparelhamento do ‘bracket’.

A segunda regra está relacionada à ordenação temporal das combinações de operadores que representam diferentes excitações. Se houver um termo que mistura operadores de excitações diferentes como os de elétrons e fônons, pode-se separá-los imediatamente. Por exemplo:

$$\begin{aligned} \langle \Phi_0 | T \hat{\psi}_{\mathbf{p}}(t) \hat{\psi}_{\mathbf{p}_1}^{\dagger}(t_1) \hat{A}_{\mathbf{q}_1}(t_1) \hat{\psi}_{\mathbf{p}_2}(t_2) \hat{\psi}_{\mathbf{p}_3}^{\dagger}(t_3) \hat{A}_{\mathbf{q}}(t_2) | \Phi_0 \rangle &= \langle \Phi_0 | T \hat{\psi}_{\mathbf{p}}(t) \hat{\psi}_{\mathbf{p}_1}^{\dagger}(t_1) \hat{\psi}_{\mathbf{p}_2}(t_2) \hat{\psi}_{\mathbf{p}_3}^{\dagger}(t_3) | \Phi_0 \rangle \\ &\langle \Phi_0 | T \hat{A}_{\mathbf{q}_1}(t_1) \hat{A}_{\mathbf{q}}(t_2) | \Phi_0 \rangle. \end{aligned} \quad (3.1.16)$$

O teorema de Wick também se aplica aos operadores de criação e destruição dos fônons.

A terceira regra diz que, quando aparecerem operadores com o mesmo tempo no emparelhamento, deve-se colocar o operador de criação à esquerda do operador de destruição, como se segue:

$$\langle \Phi_0 | T \hat{\psi}_{\mathbf{k}_1}^{\dagger}(t) \hat{\psi}_{\mathbf{k}_2}(t) | \Phi_0 \rangle = \langle \Phi_0 | \hat{\psi}_{\mathbf{k}_1}^{\dagger}(t) \hat{\psi}_{\mathbf{k}_1}(t) | \Phi_0 \rangle \delta_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2}. \quad (3.1.17)$$

Esse termo é o número médio de elétrons:

$$n(\xi_{\mathbf{k}_1}) = \theta(-\xi_{\mathbf{k}_1}) = \lim_{\beta \rightarrow \infty} \frac{1}{1 + e^{\beta \xi_{\mathbf{k}_1}}}$$

e

$$\xi_{\mathbf{k}_1} = \varepsilon_{\mathbf{k}_1} - \mu$$

nos quais o momento \mathbf{k}_1 é independente do tempo, μ é o potencial químico e $\varepsilon_{\mathbf{k}_1}$ são os auto-estados dos elétrons. Essas convenções dependem da maneira de como é escrito o operador hamiltoniano, i.e., elas são válidas se os operadores de destruição estiverem a direita dos operadores de criação em todos os termos do hamiltoniano.

Com essas três regras é possível escrever todos os termos da eq.(3.1.14) em relação aos números de partículas e às funções de Green não perturbadas de elétrons G_0 e fônons D_0 . Como exemplo, considere-se a seguinte relação para eq.(3.1.15):

$$\begin{aligned} \langle \Phi_0 | T \hat{\psi}_\alpha(t) \hat{\psi}_\beta^\dagger(t_1) \hat{\psi}_\gamma(t_2) \hat{\psi}_\delta^\dagger(t') | \Phi_0 \rangle = & - \delta_{\alpha\beta} \delta_{\gamma\delta} G_0(\alpha, t - t_1) G_0(\gamma, t_2 - t') \\ & + \delta_{\alpha\delta} \delta_{\gamma\beta} G_0(\alpha, t - t') G_0(\gamma, t_2 - t_1). \end{aligned} \quad (3.1.18)$$

Podemos representar os termos da eq. (3.1.14) por desenhos chamados de diagramas de Feynman, os quais são extremamente úteis para fornecer uma visão sobre o processo físico que esses termos representam. A representação da Função de Green do elétron ($G_0(t - t')$) no espaço tempo é dada por uma linha contínua que sai de t para t' . A representação da função de Green do fônon ($D_0(\mathbf{q}, t - t')$) é dada por uma linha tracejada e a representação do número de ocupação ($n(\xi)$) é dada por uma linha sólida que faz um 'loop' que se inicia e termina no mesmo ponto, como mostra a figura (3.1).

$$G_0(\vec{p}, t - t') = \begin{array}{c} \vec{p} \\ \text{—————} \\ t \qquad \qquad t' \end{array}$$

$$D_0(\vec{q}, t - t') = \begin{array}{c} \vec{q} \\ \text{-----} \\ t \qquad \qquad t' \end{array}$$

$$n(\xi) = \begin{array}{c} \vec{p} \\ \text{○} \\ t \end{array}$$

Figura 3.1 – Diagramas de Feynman.

Dessa forma, todos os termos encontrados pelo teorema de Wick da integral da eq. (3.1.14) poderão ser representados por combinações dos diagramas da figura (3.1). A partir destas combinações de diagramas, surgirão as categorias dos diagramas conectados e desconectados, como mostra o exemplo da figura (3.2).

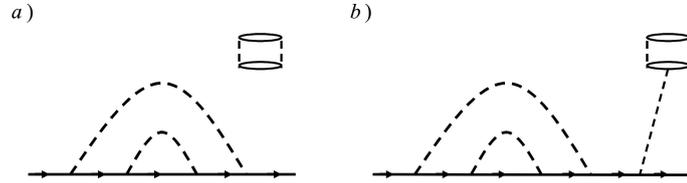


Figura 3.2 – a) Diagrama Desconectado b) Diagrama Conectado.

As partes desconectadas fornecem constantes F_i que multiplicam as partes conectadas.

Voltemos agora no termo ${}_0\langle |S(\infty, -\infty)| \rangle_0$ da eq.(3.1.14), ignorado anteriormente, dado por:

$$\langle \Phi_0 | S(\infty, -\infty) | \Phi_0 \rangle = 1 + \frac{(-i)^2}{2!} \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \int_{-\infty}^{\infty} dt_2 \langle \Phi_0 | T \hat{V}(t_1) \hat{V}(t_2) | \Phi_0 \rangle + \dots \quad (3.1.19)$$

Os termos da série ${}_0\langle |S(\infty, -\infty)| \rangle_0$ são chamados de polarização do vácuo e são iguais as constantes F_i dos termos desconectados,

$$\langle \Phi_0 | S(\infty, -\infty) | \Phi_0 \rangle = \sum_{i=0}^{\infty} F_i. \quad (3.1.20)$$

O teorema do cancelamento também simplifica o cálculo da expansão da função de Green e diz que a soma dos termos de polarização do vácuo cancelam-se com a soma dos termos desconectados da expansão do numerador da eq. (3.1.14). Assim somente os termos conectados $G_c(\mathbf{p}, t - t')$ contribuem na expansão,

$$\begin{aligned} G(\mathbf{p}, t - t') &= G_c(\mathbf{p}, t - t') \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-i)^{n+1}}{n!} \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \dots \int_{-\infty}^{\infty} dt_n \langle \Phi_0 | T \hat{\psi}_{\mathbf{p}}(t) \hat{V}(t_1) \dots \hat{V}(t_n) \hat{\psi}_{\mathbf{p}}^{\dagger}(t') | \Phi_0 \rangle \end{aligned} \quad (3.1.21)$$

O fator $\frac{1}{n!}$ da eq. (3.1.21) também se cancela, pois para cada termo conectado da expansão, haverá um número $n!$ de termos iguais. Assim a eq. (3.1.21) se reduz aos termos conectados e diferentes:

$$\begin{aligned} G(\mathbf{p}, t - t') &= \sum_{n=0}^{\infty} (-i)^{n+1} \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \dots \int_{-\infty}^{\infty} dt_n \langle \Phi_0 | T \hat{\psi}_{\mathbf{p}}(t) \hat{V}(t_1) \dots \\ &\quad \dots \hat{V}(t_n) \hat{\psi}_{\mathbf{p}}^{\dagger}(t') | \Phi_0 \rangle, \text{ conectados e diferentes.} \end{aligned} \quad (3.1.22)$$

3.1.1.2 Equação de Dyson

Podemos definir a função de Green dos elétrons em termos da energia tomando a transformada de Fourier.

$$G(\mathbf{p}, E) = \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{iE(t-t')} G(\mathbf{p}, t - t'). \quad (3.1.23)$$

Considerando uma partícula livre na banda de condução, a integral no tempo para a função de Green não-perturbada oferece o seguinte resultado:

$$G_0(\mathbf{p}, E) = [E - \varepsilon_{\mathbf{p}} + i\eta]^{-1}, \quad (3.1.24)$$

em que $\varepsilon_{\mathbf{p}}$ é a energia do elétron e η é uma quantidade infinitesimal. Podemos, da mesma forma, definir o operador $G(\mathbf{p}, E)$ como:

$$G(\mathbf{p}, E) = [E - \varepsilon_{\mathbf{p}} + i\eta - V]^{-1}, \quad (3.1.25)$$

onde V é o potencial perturbativo. Chamando $\omega = E + i\eta$ e aplicando $G_0(\mathbf{p}, \omega)$ pela esquerda e pela direita na expressão (3.1.25), chegamos a:

$$G(\mathbf{p}, \omega) = \frac{G_0(\mathbf{p}, \omega)}{1 - G_0(\mathbf{p}, \omega)V} \quad (3.1.26)$$

Usando a expansão geométrica de $\frac{1}{1-x}$, em potências de x , leva diretamente a

$$G(\mathbf{p}, \omega) = G_0(\mathbf{p}, \omega) + G_0(\mathbf{p}, \omega)V G_0(\mathbf{p}, \omega) + G_0(\mathbf{p}, \omega)V G_0(\mathbf{p}, \omega)V G_0(\mathbf{p}, \omega) + \dots \quad (3.1.27)$$

que é conhecida como expansão de Dyson. Ao representarmos o operador auto-energia como

$$\Sigma(\mathbf{p}, \omega) = V + V G_0(\mathbf{p}, \omega)V + \dots \quad (3.1.28)$$

pode-se escrever a equação de Dyson:

$$G(\mathbf{p}, \omega) = G_0(\mathbf{p}, \omega) + G_0(\mathbf{p}, \omega)\Sigma(\mathbf{p}, \omega)G(\mathbf{p}, \omega). \quad (3.1.29)$$

3.1.2 Função de Green termodinâmica

Ao considerarmos temperaturas finitas, o valor esperado que aparece na função de Green deve conter o fator térmico $e^{-\beta(H-\mu N)}$ e os operadores de representação de Heisenberg $c_{\mathbf{p}}(t), c_{\mathbf{p}}^{\dagger}(t')$ dependentes do tempo. Isto torna a expansão dos termos muito difíceis. Como um caminho alternativo vamos utilizar a técnica de Matsubara que introduz um tempo complexo $\tau = it$. Desta forma, consideremos um sistema de elétrons ou de fônons interagindo com um reservatório térmico tal que a temperatura e o potencial químico μ do sistema permaneçam constantes. Define-se a função de Green de Matsubara como:

$$\begin{aligned} G(\mathbf{p}, \tau - \tau') &= -\langle T_{\tau} c_{\mathbf{p}}(\tau) c_{\mathbf{p}}^{\dagger}(\tau') \rangle \\ &= -Tr \left(e^{-\beta(K-\Omega)} T_{\tau} e^{\tau K} c_{\mathbf{p}} e^{-K(\tau-\tau')} c_{\mathbf{p}}^{\dagger} e^{\tau' K} \right), \end{aligned} \quad (3.1.30)$$

$$Z = e^{-\beta\Omega} = Tr \left(e^{-\beta K} \right) \quad (3.1.31)$$

e

$$K = H - \mu N, \quad (3.1.32)$$

sendo Z a função de partição, Tr o operador traço, $\tau = it$, $\beta = 1/k_B T$ (k_B é a constante de Boltzmann), μ o potencial químico, H dado pela relação (3.1.3) e N é o operador número. Neste caso é usado o ensemble gran-canônico na definição da função de Green. Esta é utilizada respeitando a condição de contorno para $-\beta < \tau < 0$.

$$G(\mathbf{p}, \tau) = -G(\mathbf{p}, \tau + \beta). \quad (3.1.33)$$

Isto sugere uma expansão de Fourier no intervalo $[0, \beta]$:

$$G(\mathbf{p}, \tau) = \frac{1}{\beta} \sum_n e^{-i\omega_n \tau} G(\mathbf{p}, i\omega_n), \quad (3.1.34)$$

$$G(\mathbf{p}, i\omega_n) = \int_{-\beta}^{\beta} d\tau G(\mathbf{p}, \tau) e^{i\tau\omega_n}, \quad (3.1.35)$$

onde as frequências são dadas por:

$$\omega_n = \frac{2\pi(2n+1)}{\beta}. \quad (3.1.36)$$

Para bósons, a função de Green é periódica, ou seja, (3.1.33) possui sinal positivo no lado direito e as frequências (3.1.36) envolvem inteiros pares [Mahan 1990]. Assim como para função de Green à temperatura igual a zero, pode-se definir para os elétrons, a seguinte função de Green de Matsubara não-perturbada ($V=0$):

$$G_0(\mathbf{p}, i\omega_n) = \frac{1}{\omega_n - \xi_{\mathbf{p}}}, \quad (3.1.37)$$

onde $\xi_{\mathbf{p}} = \varepsilon_{\mathbf{p}} - \mu$. Os cálculos realizados com a função de Green de Matsubara são similares aos feitos anteriormente para $T = 0$, porém, a variável temporal é imaginária. Isto nos permite definir a matriz S para $T = 0$, como:

$$S(\tau_1, \tau_2) = T_{\tau} \exp \left[- \int_{\tau_1}^{\tau_2} d\tau \hat{V}(\tau) \right]. \quad (3.1.38)$$

Define-se a notação para a média do operador θ a $T = 0$,

$${}_0\langle \theta \rangle = Tr[e^{-\beta K_0} \theta], \quad (3.1.39)$$

no qual $K_0 = H_0 - \mu N$. Desta maneira, chega-se a seguinte expressão para (3.1.30):

$$G(\mathbf{p}, \tau) = - \frac{{}_0\langle T_{\tau} [S(\beta) \hat{c}_{\mathbf{p}}(\tau) \hat{c}_{\mathbf{p}}^{\dagger}(0)] \rangle}{{}_0\langle S(\beta) \rangle}, \quad (3.1.40)$$

em que:

$$\hat{c}_{\mathbf{p}}(\tau) = e^{\tau K_0} c_{\mathbf{p}} e^{-\tau K_0}. \quad (3.1.41)$$

Nessa representação de interação a temperatura finita, vale o equivalente ao teorema de Wick:

$$G(\mathbf{p}, \tau) = - \sum_{n=0} (-1)^n \int_0^\beta d\tau_1 \dots \int_0^\beta d\tau_n \times {}_0 \langle |T \hat{c}_{\mathbf{p}}(\tau) \hat{V}(\tau_1) \dots \hat{V}(\tau_n) \hat{c}_{\mathbf{p}}^\dagger(0)| \rangle, \quad \text{conectados e diferentes.} \quad (3.1.42)$$

A expansão de Fourier $G(\mathbf{p}, i\omega_n)$ leva à equação de Dyson:

$$G(\mathbf{p}, i\omega_n) = \frac{G_0(\mathbf{p}, i\omega_n)}{1 - G_0(\mathbf{p}, i\omega_n) \Sigma(\mathbf{p}, i\omega_n)} \quad (3.1.43)$$

ou

$$G(\mathbf{p}, i\omega) = G_0(\mathbf{p}, i\omega) + G_0(\mathbf{p}, i\omega) \Sigma(\mathbf{p}, i\omega) G(\mathbf{p}, i\omega), \quad (3.1.44)$$

Afim de se encontrar grandezas físicas tais como susceptibilidade e condutividade elétrica, podem-se definir as funções de Green retardadas $G^r(\mathbf{p}, t - t')$ e avançadas $G^a(\mathbf{p}, t - t')$, da forma:

$$G^r(\mathbf{p}, t - t') = -i\theta(t - t') \langle [c_{\mathbf{p}}(t) c_{\mathbf{p}}^\dagger(t') + c_{\mathbf{p}}^\dagger(t') c_{\mathbf{p}}(t)] \rangle. \quad (3.1.45)$$

e

$$G^a(\mathbf{p}, t - t') = i\theta(t' - t) \langle [c_{\mathbf{p}}(t) c_{\mathbf{p}}^\dagger(t') + c_{\mathbf{p}}^\dagger(t') c_{\mathbf{p}}(t)] \rangle, \quad (3.1.46)$$

em que

$$c_{\mathbf{p}}(t) = e^{itK} c_{\mathbf{p}} e^{-itK}.$$

É importante ressaltar que o método das funções de Green é proveniente da teoria de campos, onde estas são definidas como médias quânticas de operadores de campo. A sua utilização na mecânica estatística é, de fato, uma extensão do método para temperaturas finitas, isto é, as médias são efetuadas não no estado fundamental, como em teoria de campos, porém no ensemble canônico.

3.2 Função de Green fora do equilíbrio

Até este momento, consideramos sistemas com funções de Green à temperatura zero e diferente de zero tomadas no equilíbrio termodinâmico. Entretanto, a heteroestrutura considerada neste trabalho deixa o equilíbrio a partir do momento em que se aplica um potencial externo. A temperatura e o potencial químico não são considerados na dupla barreira, apenas nos reservatórios de contatos que estão em equilíbrio.

Para tais sistemas, não se pode garantir o retorno ao estado inicial após um grande intervalo de tempo. A formulação teórica fora do equilíbrio é um pouco mais complexa que no caso de equilíbrio, porém são parecidas na essência. Consideremos um sistema cuja a dinâmica é dada pelo hamiltoniano,

$$H = h + H'(t), \quad (3.2.1)$$

em que

$$h = H_0 + H_i, \quad (3.2.2)$$

onde H_0 é a parte diagonalizável (que pode ser expressa por um par de operadores criação e aniquilação) e H_i contém os termos de muitos corpos. Vamos supor que o termo fora do equilíbrio $H'(t)$ passe a atuar depois do instante t_0 , onde faremos $t_0 \rightarrow -\infty$. Desta forma, para $t < t_0$, o sistema pode ser descrito pelo matriz densidade no equilíbrio termodinâmico:

$$\rho(h) = \frac{e^{-\beta h}}{\text{Tr}[e^{\beta h}]}. \quad (3.2.3)$$

O valor esperado para o observável O em $t \geq t_0$ será calculado como

$$\langle O(t) \rangle = \text{Tr}[\rho(h)O_H(t)]. \quad (3.2.4)$$

em que o operador $O_H(t)$ está na representação de Heisenberg cuja dinâmica é governada pelo hamiltoniano total. Com o intuito de escapar de termos complicados como H_i e $H'(t)$, vamos usar a transformação

$$O_H(t) = v_h^\dagger(t, t_0) O_h(t) v_h(t, t_0), \quad (3.2.5)$$

em que

$$v_h(t, t_0) = T \left\{ \exp \left[-i \int_{t_0}^t dt' H'_h(t') \right] \right\} \quad (3.2.6)$$

e $H'_h(t')$ está na representação de interação:

$$H'_h(t) = e^{ih(t-t_0)} H'(t) e^{-ih(t-t_0)}. \quad (3.2.7)$$

O operador $O_H(t)$ pode agora ser escrito usando um ordenamento temporal num contorno. Este vai de t_0 a t e retorna a t_0 no contorno C no plano complexo conforme a figura (3.3).

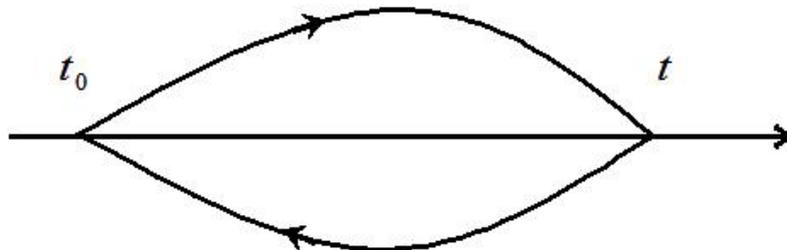


Figura 3.3 – Circuito utilizado para o ordenamento temporal da função de Green fora do equilíbrio

A expressão (3.2.5) pode ser escrita de uma forma equivalente, como:

$$O_H(t) = T_C \left\{ \exp \left[-i \int_{C_t} d\tau H'_h(\tau) \right] O_h(t) \right\}. \quad (3.2.8)$$

O contorno C_t envolve o eixo real saindo de t_0 até t e voltando ao ponto inicial. O operador T_C ordena os tempos de acordo com suas posições no contorno. O que estiver mais próximo do fim do contorno vai para esquerda.

A função de Green fora do equilíbrio é definida em termos do ordenamento temporal no circuito do plano complexo já mostrado na figura (3.3). Temos, a função de Green em dois tempos t_1 e t'_1 , que são dispostos no eixo real do circuito, conforme a figura (3.4).

$$G(1, 1') \equiv -i \langle T_C [\psi_H(1) \psi_H^\dagger(1')] \rangle, \quad (3.2.9)$$

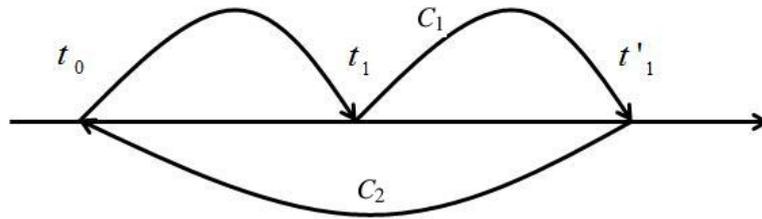


Figura 3.4 – Circuito usado na definição da função de Green temporalmente ordenada

O contorno C começa e termina em t_0 . Na relação acima (3.2.9), $\psi_H(1)$ e $\psi_H^\dagger(1')$ são os operadores de férmions vistos anteriormente

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \sum_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) c_{\mathbf{k}}(t),$$

$$\psi^\dagger(\mathbf{r}, t) = \sum_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}) c_{\mathbf{k}}^\dagger(t),$$

na representação de Heisenberg. A notação adotada é $(1) \equiv (\mathbf{r}_1, t_1)$, C_1 é o contorno de ida no plano complexo e C_2 é o contorno de volta no plano complexo. Desta forma vamos definir quatro funções de Green geradas pela relação (3.2.9).

$$G(1, 1') = \begin{cases} G_c(1, 1'), & t_1, t'_1 \in C_1 \\ G^>(1, 1'), & t_1 \in C_2, t'_1 \in C_1 \\ G^<(1, 1'), & t_1 \in C_1, t'_1 \in C_2 \\ G_{\bar{c}}(1, 1'), & t_1, t'_1 \in C_2 \end{cases} \quad (3.2.10)$$

em que G_c é a função de Green causal,

$$\begin{aligned} G_c(1, 1') &= -i \langle T [\psi_H(1) \psi_H^\dagger(1')] \rangle \\ &= -i \theta(t_1 - t'_1) \langle \psi_H(1) \psi_H^\dagger(1') \rangle + \\ &+ i \theta(t'_1 - t_1) \langle \psi_H^\dagger(1') \psi_H(1) \rangle, \end{aligned} \quad (3.2.11)$$

$G^>$ é a função maior,

$$G^>(1, 1') = -i \langle [\psi_H(1) \psi_H^\dagger(1')] \rangle, \quad (3.2.12)$$

$G^<$ é a função menor,

$$G^<(1, 1') = i\langle[\psi_H^\dagger(1')\psi_H(1)]\rangle \quad (3.2.13)$$

e $G_{\bar{c}}$ é a função anti-causal,

$$\begin{aligned} G_{\bar{c}}(1, 1') &= -i\langle\tilde{T}[\psi_H(1)\psi_H^\dagger(1')]\rangle \\ &= -i\theta(t'_1 - t_1)\langle\psi_H(1)\psi_H^\dagger(1')\rangle + \\ &+ i\theta(t_1 - t'_1)\langle\psi_H^\dagger(1')\psi_H(1)\rangle. \end{aligned} \quad (3.2.14)$$

O operador \tilde{T} ordena os operadores de uma forma oposta ao operador T , i.e., os operadores com os tempos maiores ficam à direita dos que tiverem tempos menores. Note que

$$G_c + G_{\bar{c}} = G^> + G^<.$$

Em seguida temos as funções de Green avançada e retardada.

$$\begin{aligned} G^a(1, 1') &= -i\theta(t'_1 - t_1)\langle\{\psi_H(1)\psi_H^\dagger(1')\}\rangle \\ &= \theta(t'_1 - t_1)[G^<(1, 1') - G^>(1, 1')] \end{aligned} \quad (3.2.15)$$

e

$$\begin{aligned} G^r(1, 1') &= -i\theta(t_1 - t'_1)\langle\{\psi_H(1)\psi_H^\dagger(1')\}\rangle \\ &= \theta(t_1 - t'_1)[G^>(1, 1') - G^<(1, 1')]. \end{aligned} \quad (3.2.16)$$

Neste caso, os chaves representam a anticomutação. Podemos observar que

$$G^r - G^a = G^> - G^<.$$

Esse formalismo foi desenvolvido quase simultaneamente por Keldysh e por Kadanoff e Baym.

De posse dessas definições, podemos achar uma nova relação em que a função de Green de contorno (3.2.9) e o teorema de Wick [Mahan 1990] podem ser aplicados. Primeiro transforma-se a dependência de H para h .

$$G(1, 1') = -i\langle T_C[S_C^H \psi_h(1)\psi_h^\dagger(1')] \rangle, \quad (3.2.17)$$

sendo

$$S_C^H = \exp\left[-i \int_C d\tau H'_h(\tau)\right]. \quad (3.2.18)$$

Lembrando que h contém dois termos $h = H_0 + H_i$ e que o teorema de Wick opera somente com H_0 , cálculos extensos são feitos [Rammer 1998], sendo o resultado final dado por:

$$G(1, 1') = -i \frac{\text{Tr}\left\{\rho_0 T_{C_v}\left[S_{C_v}^i S'_C \psi_{H_0}(1)\psi_{H_0}^\dagger(1')\right]\right\}}{\text{Tr}\left[\rho_0 T_{C_v}(S_{C_v}^i S'_C)\right]}, \quad (3.2.19)$$

no qual

$$\rho_0 = \frac{\exp(-\beta H_0)}{\text{Tr}[\exp(-\beta H_0)]}, \quad (3.2.20)$$

$$S'_C = \exp \left[-i \int_C d\tau H'_{H_0}(\tau) \right] \quad (3.2.21)$$

e

$$S'_{C_v} = \exp \left[-i \int_{C_v} d\tau H'_{H_0}(\tau) \right]. \quad (3.2.22)$$

O contorno C_v é representado na figura (3.5). O denominador gera os diagramas desconexos, como ocorre na expansão para o sistema em equilíbrio. Assim, ficamos com os diagramas conexos do numerador. Ao fazermos a expansão da função de Green ordenada no contorno,

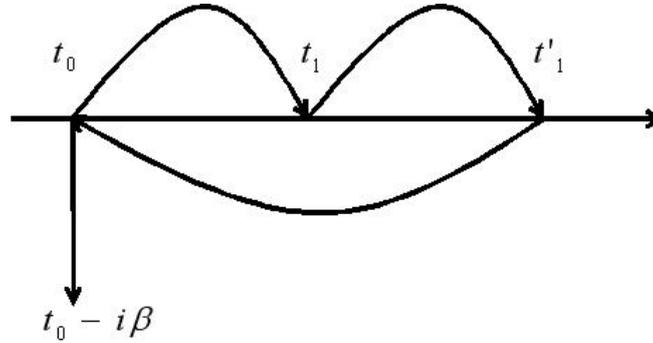


Figura 3.5 – Contorno C_v utilizado no ordenamento temporal da F.G, a fim de que seja possível o uso do teorema de Wick na expansão .

iremos obter uma equação de Dyson fora do equilíbrio semelhante ao caso do equilíbrio. Assim, a seguinte equação de Dyson para sistemas fora do equilíbrio é obtida:

$$G(1,2) = G_0(1,2) + \int d^3x_3 \int d^3x_4 \int_{C_v} d\tau_3 \int_{C_v} d\tau_4 G_0(1,3) \Sigma(3,4) G(4,2), \quad (3.2.23)$$

em que as auto-energias $\Sigma(G)$ contém as interações. Fazendo $t_0 \rightarrow -\infty$, perdemos os termos transientes, mas ganhamos enormemente com a simplificação do problema, pois os dois circuitos, C e C_v , coincidem.

Pode-se obter a equação de Dyson em termos da seguinte equação matricial [Mahan 1990].

$$\tilde{\mathbf{G}}(1,2) = \tilde{\mathbf{G}}_0(1,2) + \int d^3x_3 \int d^3x_4 \int_C d\tau_3 \int_C d\tau_4 \tilde{\mathbf{G}}_0(1,3) \tilde{\Sigma}(3,4) \tilde{\mathbf{G}}(4,2), \quad (3.2.24)$$

sendo

$$\tilde{\mathbf{G}} = \begin{bmatrix} G_c & -G^< \\ G^> & -G_{\bar{c}} \end{bmatrix}, \quad (3.2.25)$$

$$\tilde{\Sigma} = \begin{bmatrix} \Sigma_c & -\Sigma^< \\ \Sigma^> & -\Sigma_{\tilde{c}} \end{bmatrix}. \quad (3.2.26)$$

Ao se escrever a equação (3.2.24) de forma que o produto das matrizes resulte numa integral sobre as quatro variáveis ($d\vec{r}, d\tau$), obtemos a equação de Dyson similar à encontrada anteriormente.

$$\tilde{\mathbf{G}} = \tilde{\mathbf{G}}_0 + \tilde{\mathbf{G}}_0 \tilde{\Sigma} \tilde{\mathbf{G}}. \quad (3.2.27)$$

3.2.1 Prolongamento analítico

Considerando as expansões na equação de Dyson vistas acima, foram encontrados produtos de funções de Green a serem realizadas em tempos complexos intermediários, efetuadas no contorno C , o que gera integrais da forma:

$$C(t_1, t'_1) = \int_C d\tau A(t_1, \tau) B(\tau, t'_1), \quad (3.2.28)$$

A integral é tomada ao longo do circuito representado na figura (3.6). Para isso, vamos considerar que $t_1 < t'_1$, ou seja, t'_1 vem posteriormente a t_1 ao longo do contorno. Desta forma vamos admitir que a função $C(t_1, t'_1)$ seja uma função menor $C^<(t_1, t'_1)$, como em (3.2.25). Podemos

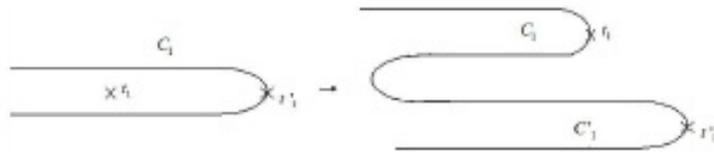


Figura 3.6 – Deformação do contorno C .

expressar (3.2.28) como:

$$\begin{aligned} C^<(t_1, t'_1) &= \int_{-\infty}^{t_1} d\tau A(t_1, \tau) B(\tau, t'_1) + \int_{t_1}^{t'_1} d\tau A(t_1, \tau) B(\tau, t'_1) + \\ &+ \int_{t'_1}^{-\infty} d\tau A(t_1, \tau) B(\tau, t'_1). \end{aligned} \quad (3.2.29)$$

Redefinindo a integral $\int_{t'_1}^{t'_1}$ na forma $\int_{t'_1}^{t'_1} = \int_{t_1}^{-\infty} + \int_{-\infty}^{t'_1}$, teremos:

$$\begin{aligned} C^<(t_1, t'_1) &= \int_{-\infty}^{t_1} d\tau A(t_1, \tau) B(\tau, t'_1) + \int_{t_1}^{-\infty} d\tau A(t_1, \tau) B(\tau, t'_1) \\ &+ \int_{-\infty}^{t'_1} d\tau A(t_1, \tau) B(\tau, t'_1) + \int_{t'_1}^{-\infty} d\tau A(t_1, \tau) B(\tau, t'_1). \end{aligned} \quad (3.2.30)$$

Isto equivale a integrar no segundo contorno de (3.6). Tal deformação no contorno para efetuar a continuação analítica de um produto foi proposto por D.C. Langreth [Langreth 1976]. Percebe-se que teremos $A^>(t_1, t)$ e $B^<(t, t'_1)$, pois as integrais envolvem tempos menores que t_1 e t'_1 no sentido do contorno. Resultando em :

$$\begin{aligned} C^<(t_1, t'_1) &= \int_{-\infty}^{t_1} dt A^>(t_1, t) B^<(t, t'_1) + \int_{t_1}^{-\infty} dt A^<(t_1, t) B^<(t, t'_1) \\ &+ \int_{-\infty}^{t'_1} dt A^<(t_1, t) B^<(t, t'_1) + \int_{t'_1}^{-\infty} dt A^<(t_1, t) B^>(t, t'_1). \end{aligned} \quad (3.2.31)$$

Invertendo os limites de integração do 2º e 4º termos e reagrupando, obtém-se:

$$\begin{aligned} C^<(t_1, t'_1) &= \int_{-\infty}^{t_1} dt [A^>(t_1, t) - A^<(t_1, t)] B^<(t, t'_1) \\ &+ \int_{-\infty}^{t'_1} dt A^<(t_1, t) [B^<(t, t'_1) - B^>(t, t'_1)]. \end{aligned} \quad (3.2.32)$$

Utilizando-se das funções degrau, pode-se fazer $t_1 = t'_1 \rightarrow \infty$ na expressão acima

$$\begin{aligned} C^<(t_1, t'_1) &= \int_{-\infty}^{\infty} dt \theta(t_1 - t) [A^>(t_1, t) - A^<(t_1, t)] B^<(t, t'_1) \\ &+ \int_{-\infty}^{\infty} dt A^<(t_1, t) \theta(t'_1 - t) [B^<(t, t'_1) - B^>(t, t'_1)]. \end{aligned} \quad (3.2.33)$$

e usando as definições (3.2.15) e (3.2.16), obtêm-se:

$$C^<(t_1, t'_1) = \int_{-\infty}^{\infty} dt A^r(t_1, t) B^<(t, t'_1) + \int_{-\infty}^{\infty} dt A^<(t_1, t) B^a(t, t'_1). \quad (3.2.34)$$

O mesmo resultado é obtido para a função de Green maior simplesmente trocando $<$ por $>$. Pode-se generalizar (3.2.34) para um produto de três funções a serem integradas no contorno. Se, por exemplo, $D = ABC$, vamos obter [Haug e Jauho 1996]

$$D^< = A^r B^r C^< + A^r B^< C^a + A^< B^a C^a. \quad (3.2.35)$$

A função de Green retardada é obtida, substituindo-se (3.2.34) e a respectiva expressão para $C^>(t_1, t'_1)$ na eq.(3.2.16). Com isso, encontra-se,

$$\begin{aligned} C^r(t_1, t'_1) &= \theta(t_1 - t'_1) [C^>(t_1, t'_1) - C^<(t_1, t'_1)] \\ &= \theta(t_1 - t'_1) \int_{-\infty}^{\infty} dt [A^r(B^> - B^<) + (A^> - A^<)B^a] \\ &= \theta(t_1 - t'_1) \int_{-\infty}^{\infty} dt [A^r(B^r - B^a) + (A^r - A^a)B^a] \\ &= \theta(t_1 - t'_1) \int_{-\infty}^{\infty} dt [A^r B^r - A^a B^a] \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dt A^r(t_1, t) B^r(t, t'_1). \end{aligned} \quad (3.2.36)$$

Portanto se $C = AB$, a função C^r é simplesmente o produto das funções de Green retardadas A^r e B^r . Analogamente, para a função de Green avançada, obtém-se: $C^a(t_1, t'_1) = \int_{-\infty}^{\infty} dt A^a(t_1, t) B^a(t, t'_1)$. As demais relações de Langreth podem ser encontradas em [Haug e Jauho 1996].

3.2.2 Formulação de Keldysh

A fim de introduzir as equações de movimento para as funções de Green fora do equilíbrio, será apresentada a formulação de Keldysh [Keldysh 1965]. Este cálculo foi independente ao método de Kadanoff-Baym [Haug e Jauho 1996] que conduz o mesmo resultado.

Primeiramente, vamos considerar uma matriz de rotação de $\pi/4$ no plano das matrizes de $2X2$.

$$\mathbf{U} \equiv \frac{1}{\sqrt{2}}(\mathbf{I} + i\sigma_y) \quad (3.2.37)$$

e

$$\mathbf{U}^\dagger = \mathbf{U}^{-1} \equiv \frac{1}{\sqrt{2}}(\mathbf{I} - i\sigma_y), \quad (3.2.38)$$

em que \mathbf{I} é a matriz identidade de segunda ordem e σ_y é a matriz de spin de Pauli

$$\sigma_y = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}. \quad (3.2.39)$$

Aplica-se o operador \mathbf{U}^\dagger à esquerda e \mathbf{U} à direita na relação (3.2.27) e dado que $\mathbf{U}\mathbf{U}^\dagger = \mathbf{I}$ e $\tilde{\mathbf{G}}' = \mathbf{U}^\dagger \tilde{\mathbf{G}} \mathbf{U}$, teremos:

$$\tilde{\mathbf{G}}' = \tilde{\mathbf{G}}'_0 + \tilde{\mathbf{G}}'_0 \tilde{\Sigma}' \tilde{\mathbf{G}}', \quad (3.2.40)$$

em que

$$\tilde{\mathbf{G}}' = \begin{bmatrix} G^a & 0 \\ G^k & G^r \end{bmatrix}, \quad (3.2.41)$$

$$\tilde{\Sigma}' = \begin{bmatrix} \Sigma^a & 0 \\ \Sigma^k & \Sigma^r \end{bmatrix}. \quad (3.2.42)$$

A função de Keldysh G^k [Haug e Jauho 1996] é definida por:

$$G^k \equiv G_c + G_{\bar{c}} = G^< + G^>, \quad (3.2.43)$$

a função de Green avançada será:

$$G^a = G_c - G^> = G^> - G_{\bar{c}}, \quad (3.2.44)$$

e a função de de Green retardada pode ser escrita como:

$$G^r = G_c - G^< = G^< - G_{\bar{c}}. \quad (3.2.45)$$

Os termos da matriz $\tilde{\Sigma}'$ são equivalentes as da matriz $\tilde{\mathbf{G}}'$ dadas (3.2.43), (3.2.44) e (3.2.45). Assim, podem-se obter, usando (3.2.40), as relações de Dyson para os termos da diagonal principal de $\tilde{\mathbf{G}}'$.

$$G^r = G_0^r + G_0^r \Sigma^r G^r, \quad (3.2.46)$$

$$G^a = G_0^a + G_0^a \Sigma^a G^a. \quad (3.2.47)$$

estas componentes são independentes entre si, pois se relacionam apenas com as outras funções retardadas ou avançadas. Contudo o termo de $\tilde{\mathbf{G}}'$ fora da diagonal principal é dada pela função de Keldysh.

$$\begin{aligned} G^k &= (1 + G_0^r \Sigma^r) G_0^k (1 + \Sigma^a G^a) + (G_0^r + G_0^r \Sigma^r G_0^r) \Sigma^k G^a \\ &+ G_0^r \Sigma^r G_0^r \Sigma^r G^k. \end{aligned} \quad (3.2.48)$$

Pela repetição da mesma iteração infinitas vezes, chega-se a relação de Keldysh [Keldysh 1965]

$$G^k = (1 + G^r \Sigma^r) G_0^k (1 + \Sigma^a G^a) + G^r \Sigma^k G^a. \quad (3.2.49)$$

O resultado da relação (3.2.49) seria o mesmo se ao invés da função G^k fosse utilizada a função $G^<$, ou seja:

$$G^< = (1 + G^r \Sigma^r) G_0^< (1 + \Sigma^a G^a) + G^r \Sigma^< G^a. \quad (3.2.50)$$

A equação de Keldysh (3.2.50) será utilizada nos próximos capítulos para o cálculo da corrente no transporte eletrônico numa HDB fora do equilíbrio.

CAPÍTULO 4

O Transporte Eletrônico

Neste capítulo encontraremos as funções de Green retardadas de uma semicadeia infinita de átomos e da região de dispersão, assim como a corrente eletrônica na HDB.

Daqui em diante suprimiremos o supra índice r na representação das funções de Green retardadas.

4.1 Funções de Green das semicadeias e do poço

Inicialmente, consideramos uma semicadeia de átomos em que cada um possui energia ϵ , como mostra figura (4.1), onde v é o hopping entre os átomos.

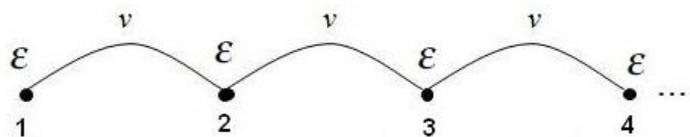


Figura 4.1 – semicadeia infinita de átomos

Obtém-se a seguinte função de Green g para o átomo isolado como:

$$g = \frac{1}{\hbar\omega - \epsilon}. \quad (4.1.1)$$

Considerando o hopping entre os átomos, usamos a relação de Dyson para obter a função de Green G_S da semi-cadeia infinita de átomos do sistema, representada por uma superfície (S)

com auto-energia Σ .

$$\begin{aligned} G_s &= g + g\Sigma G_s \\ &= \frac{1}{\hbar\omega - \varepsilon - \Sigma}. \end{aligned} \quad (4.1.2)$$

Para a semi-cadeia à direita da HDB, adotamos que $G_s = G_d$ e g é a função de Green não perturbada de um corpo em um sítio com energia $\varepsilon' = -U - 2v$. No caso da semi-cadeia à esquerda temos $\varepsilon = -2v$, em que adotamos a origem da energia na base da banda de condução. Representamos a Função de Green da superfície de uma semicadeia infinita da direita pela figura (4.2).

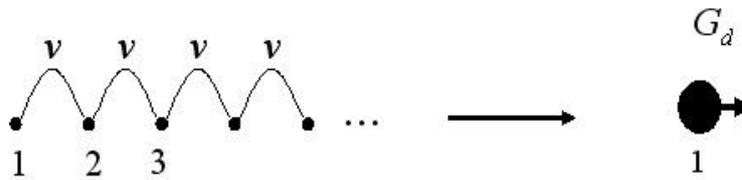


Figura 4.2 – superfície de contato para o cálculo da função de Green.

A auto-energia da superfície à direita (Σ_d) pode ser obtida ligando um corpo no sítio $j = 0$ com um contato no sítio $j = 1$ via hopping. O resultado produzirá uma nova superfície de contato conforme o diagrama (4.3).

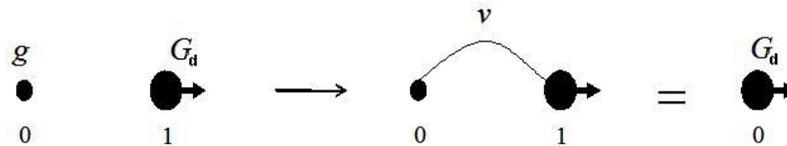


Figura 4.3 – hopping entre um corpo e a superfície de contato para o cálculo da função de Green.

Mediante a relação de Dyson na forma matricial podemos expressar a auto-energia:

$$\mathbf{G} = \mathbf{g} + \mathbf{g}\mathbf{V}\mathbf{G}, \quad (4.1.3)$$

onde a matriz interação \mathbf{V} entre os sítios é

$$\mathbf{V} = \begin{bmatrix} V_{00} & V_{01} \\ V_{10} & V_{11} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & v \\ v & 0 \end{bmatrix}, \quad (4.1.4)$$

$$\mathbf{g} = \begin{bmatrix} g & 0 \\ 0 & G_d \end{bmatrix} \quad (4.1.5)$$

e

$$\mathbf{G} = \begin{bmatrix} G_{00} & G_{01} \\ G_{10} & G_{11} \end{bmatrix}, \quad (4.1.6)$$

resultando em:

$$G_{00} = g + gvG_{10}, \quad (4.1.7)$$

$$G_{10} = G_d v G_{00}. \quad (4.1.8)$$

A função de Green G_{10} descreve a propagação do elétron entre os sítios $j = 1$ e $j = 0$. Substituindo (4.1.8) em (4.1.7) teremos:

$$G_d = g(1 + v^2 G_d^2). \quad (4.1.9)$$

Multiplicando ambos os lados de (4.1.9) por $G_d^{-2} g^{-1}$ e usando (4.1.1) e (4.1.2), chegamos a equação para auto-energia:

$$\Sigma_d^2 - (\hbar\omega - \varepsilon')\Sigma_d + v^2 = 0, \quad (4.1.10)$$

A solução de (4.1.10) é a auto-energia da semicadeia à direita como função da energia ω ,

$$\Sigma_d = \frac{1}{2} (\hbar\omega - \varepsilon') \pm \frac{1}{2} \sqrt{(\hbar\omega - \varepsilon')^2 - 4v^2}. \quad (4.1.11)$$

Para obter a função de Green da superfície que representa semicadeia à direita substituímos (4.1.11) em (4.1.2), que resulta em:

$$G_d = \frac{1}{2v^2} (\hbar\omega - \varepsilon') \pm \frac{1}{2v^2} \sqrt{(\hbar\omega - \varepsilon')^2 - 4v^2}. \quad (4.1.12)$$

Para valores de $|\hbar\omega - \varepsilon| < 2v$ teremos (4.1.12) da forma:

$$G_d = \frac{1}{2v^2} (\hbar\omega - \varepsilon') \pm \frac{i}{2v^2} \sqrt{4v^2 - (\hbar\omega - \varepsilon')^2}. \quad (4.1.13)$$

Podemos, então, determinar a função densidade de estados [Mahan 1990] para a semicadeia à direita pela lei semi-circular:

$$\rho_d = -2\Im\{G_d\} = \frac{1}{v^2} \sqrt{4v^2 - (\hbar\omega - \varepsilon')^2}. \quad (4.1.14)$$

As expressões obtidas para a semicadeia da esquerda são similares à da direita, porém trocando $\varepsilon' = -U - 2v$ por $\varepsilon = -2v$.

No caso da cadeia regular (infinita), podemos representar sua função de Green de superfície G_b , com potencial externo $U = 0$ e auto-energia 2Σ (fig.(4.4)), pela seguinte expressão:

$$\begin{aligned} G_b &= \frac{1}{\hbar\omega - \varepsilon - 2\Sigma} \\ &= \frac{1}{\mp \sqrt{(\hbar\omega - \varepsilon)^2 - 4v^2}}. \end{aligned} \quad (4.1.15)$$

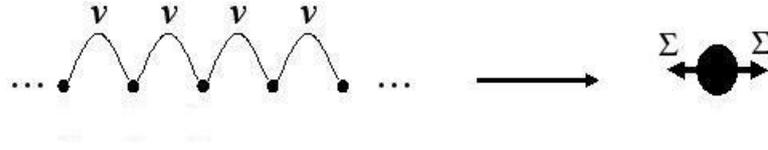


Figura 4.4 – hopping entre um corpo e a superfície de contato para o cálculo da função de Green.

Para valores em que $|\hbar\omega - \varepsilon| < 2v$ a expressão acima fica:

$$G_b = \frac{1}{\mp i\sqrt{4v^2 - (\hbar\omega - \varepsilon)^2}}, \quad (4.1.16)$$

de forma que a densidade de estados para o bulk obedece a relação:

$$\rho_b = -2\Im\{G_b\} = 2[4v^2 - (\hbar\omega - \varepsilon)^2]^{-1/2}. \quad (4.1.17)$$

Para resolver nosso problema, iremos separar a região de dispersão das semicadeias e depois reconectá-las. Serão encontrados os N estados do poço infinito a partir dos N sítios, pela resolução da equação de autovalores do poço. O perfil do poço não-retangular da região de dispersão pode ser representada na figura (4.5). Para o perfil mostrado, temos a matriz tridiagonal H'_e de ordem N escrita na base dos sítios.

$$H'_e = \begin{bmatrix} \varepsilon'_0 & v & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ v & \varepsilon'_1 & v & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & v & \varepsilon'_2 & v & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \cdots & \cdots & 0 & v & \varepsilon'_{N-1} \end{bmatrix}. \quad (4.1.18)$$

Esta matriz é a parte da Hamiltoniana (2.1.17) que vai do começo ao final da dupla barreira. Novamente usamos a notação $\varepsilon'_i = \varepsilon_i - 2v$ e não consideramos as energias de Landau E_l . A matriz acima pode ser diagonalizada através de uma mudança de base nesta região, de acordo com a equação de autovalores:

$$H'_e|m\rangle = E_m|m\rangle, \quad (4.1.19)$$

na qual

$$|m\rangle = \sum_{j=0}^N u_{mj}|j\rangle \quad (4.1.20)$$

e u_{mj} são as coordenadas dos autovetores $|m\rangle$ em relação a base ‘antiga’ $|j\rangle$ (base de Wannier). Desta forma, renomeamos os N níveis discretos do poço para $m = 0', 1', 2', \dots, N-1$, do plano da semicadeia à direita de $N, N+1, N+2, \dots$ para $1, 2, \dots$, e o dos planos à esquerda de $-1, -2, \dots, -\infty$ para $\bar{1}, \bar{2}, \dots$

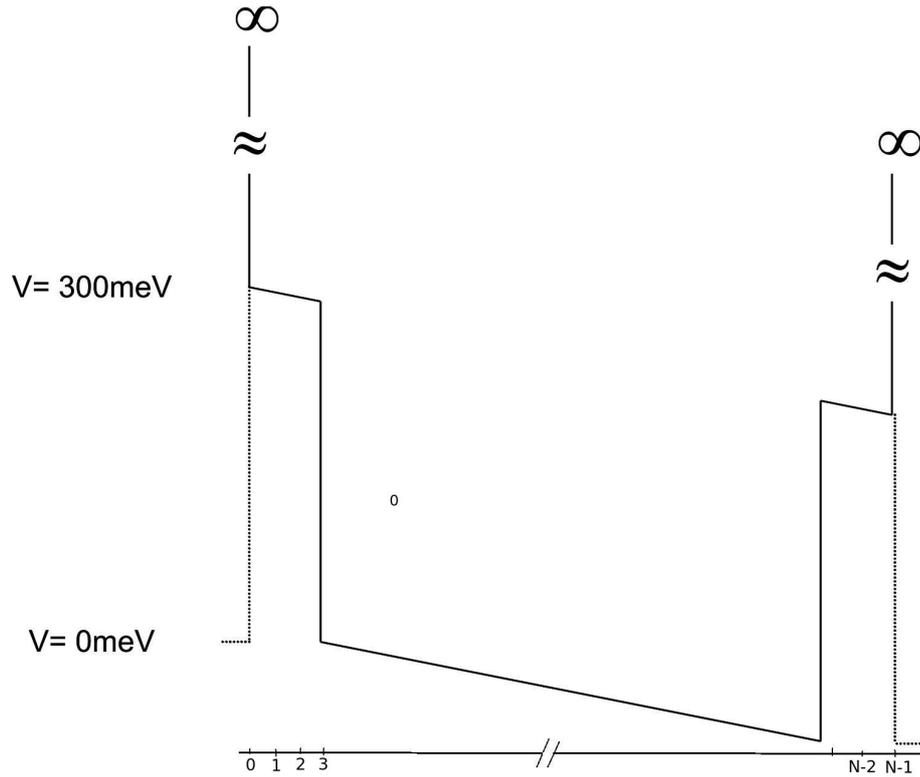


Figura 4.5 – Região de dispersão.

Dos N auto-vetores do região de dispersão, apenas os dois menos energéticos participam diretamente da corrente eletrônica, já que os outros estados estão acima do nível de Fermi e serão considerados na renormalização. Os estados do poço e as semicadeias são conectados mediante os elementos de matriz:

$$v_{jm} = \langle j | \hat{H}_e | m \rangle, \quad (4.1.21)$$

onde temos os termos $v_{\bar{1}m} = v_{0m}$ e $v_{m1} = v_{mN-1}$.

Para um corpo na região de espalhamento, podemos definir a função de Green não perturbada como:

$$g_m = \frac{1}{\hbar\omega - E_m}. \quad (4.1.22)$$

As semicadeias da direita ($j = 1$) e da esquerda ($j = \bar{1}$) podem ser representadas por superfícies de contato localizadas com auto-energia (Σ), o que permite escrever suas funções de Green da forma:

$$g_{\bar{1}} = G_e = \frac{1}{\hbar\omega - \varepsilon_{\bar{1}} - \Sigma_e}, \quad (4.1.23)$$

$$g_1 = G_d = \frac{1}{\hbar\omega - \varepsilon_1 - \Sigma_d}, \quad (4.1.24)$$

em que $\varepsilon_{\bar{1}} = -2v$ e $\varepsilon_1 = -U - 2v$. Através da equação de Dyson, podemos reconectar as semicadeias à região de espalhamento (fig.4.6) e encontrar as seguintes relações:

$$G_{\bar{1}\bar{1}} = g_{\bar{1}} + g_{\bar{1}} \sum_m v_{\bar{1},m} G_{m\bar{1}}, \quad (4.1.25)$$

$$G_{11} = g_1 + g_1 \sum_m v_{1,m} G_{m1}, \quad (4.1.26)$$

$$G_{mj} = g_{mm}(v_{m\bar{1}} G_{\bar{1}j} + v_{m1} G_{1j}) \quad \text{em que } j = \bar{1}, 1. \quad (4.1.27)$$

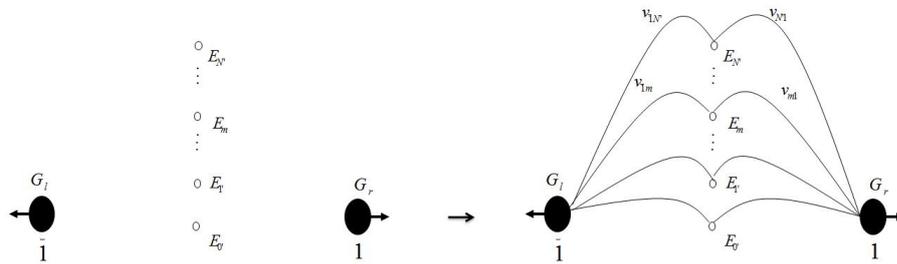


Figura 4.6 – Reconexão entre os contatos e a região de dispersão.

Ao substituir a equação (4.1.27) em (4.1.25) chegamos em :

$$G_{\bar{1}\bar{1}} = g_{\bar{1}} + g_{\bar{1}} \sum_m v_{\bar{1}m} g_m v_{m\bar{1}} G_{\bar{1}\bar{1}} + g_{\bar{1}} \sum_m v_{\bar{1}m} g_m v_{m1} G_{1\bar{1}} \quad (4.1.28)$$

ou

$$G_{\bar{1}\bar{1}} = g_{\bar{1}} + g_{\bar{1}} \tilde{v}_{\bar{1}\bar{1}} G_{\bar{1}\bar{1}} + g_{\bar{1}} \Sigma_{\bar{1}} G_{1\bar{1}}, \quad (4.1.29)$$

onde

$$\Sigma_j = \sum_m v_{jm} g_m v_{mj}, \quad \text{para } j = \bar{1}, 1 \quad (4.1.30)$$

$$\tilde{v}_{\bar{1}\bar{1}} = \tilde{v}_{1\bar{1}} = \sum_m v_{\bar{1}m} g_m v_{m1}. \quad (4.1.31)$$

Da mesma maneira, ao substituir (4.1.27) em (4.1.26), chegamos em:

$$G_{11} = g_1 + g_1 \tilde{v}_{1\bar{1}} G_{\bar{1}1} + g_1 \Sigma_1 G_{11}. \quad (4.1.32)$$

Reescrevendo a expressão (4.1.29) obtêm-se:

$$\begin{aligned} G_{\bar{1}\bar{1}} &= \left(g_{\bar{1}}^{-1} + \Sigma_{\bar{1}} \right)^{-1} + \left(g_{\bar{1}}^{-1} - \Sigma_{\bar{1}} \right)^{-1} \tilde{v}_{\bar{1}\bar{1}} G_{1\bar{1}} \\ &= \tilde{g}_{\bar{1}} + \tilde{g}_{\bar{1}} \tilde{v}_{\bar{1}\bar{1}} G_{1\bar{1}}. \end{aligned} \quad (4.1.33)$$

Da mesma forma, obtemos:

$$G_{11} = \tilde{g}_1 + \tilde{g}_1 \tilde{v}_{1\bar{1}} G_{\bar{1}1}, \quad (4.1.34)$$

em que

$$\tilde{g}_{\bar{1}} = \frac{1}{\hbar\omega - \varepsilon_{\bar{1}} - \Sigma_e - \Sigma_{\bar{1}}}, \quad (4.1.35)$$

$$\tilde{g}_1 = \frac{1}{\hbar\omega - \varepsilon_1 - \Sigma_d - \Sigma_1}, \quad (4.1.36)$$

Os termos acima representam as funções de Green dos sítios renormalizados $\bar{1}$ e 1. Observa-se, através das substituições feitas, que as funções (4.1.33) e (4.1.34) não dependem explicitamente dos N auto-estados do poço. Este método de simplificação da equação de Dyson é denominado dizimação. Vamos achar $G_{\bar{1}1}$ através da dizimação.

Da equação de Dyson temos.

$$G_{\bar{1}1} = g_{\bar{1}} \sum_k v_{\bar{1}k} G_{k1}. \quad (4.1.37)$$

Substituindo (4.1.27) em (4.1.37) temos:

$$G_{\bar{1}1} = g_{\bar{1}} \Sigma_{\bar{1}} G_{\bar{1}1} + g_{\bar{1}} \tilde{v}_{1\bar{1}} G_{11}, \quad (4.1.38)$$

Simplificando a expressão acima, chegamos aos termos não-diagonais de \mathbf{G} .

$$\begin{aligned} G_{\bar{1}1} &= (g_{\bar{1}}^{-1} - \Sigma_{\bar{1}})^{-1} \tilde{v}_{1\bar{1}} G_{11} \\ &= \tilde{g}_{\bar{1}} \tilde{v}_{1\bar{1}} G_{11} \end{aligned} \quad (4.1.39)$$

e

$$\begin{aligned} G_{1\bar{1}} &= (g_1^{-1} - \Sigma_1)^{-1} \tilde{v}_{1\bar{1}} G_{\bar{1}\bar{1}} \\ &= \tilde{g}_1 \tilde{v}_{1\bar{1}} G_{\bar{1}\bar{1}} \end{aligned} \quad (4.1.40)$$

As expressões (4.1.32), (4.1.33), (4.1.39) e (4.1.40) representam as semicadeias esquerda e direita renormalizadas pelas superfícies de contato com funções de Green $\tilde{g}_{\bar{1}}$ e \tilde{g}_1 ligadas via “hopping” $\tilde{v}_{1\bar{1}}$ renormalizado como mostra a figura (4.7).

Para calcular a corrente eletrônica será necessário determinar a função de Green retardada $G_{\bar{1}1}$ que fornece a propagação entre os sítios $\bar{1}$ e 1. Para isto, usaremos a expressão matricial de Dyson:

$$\mathbf{G} = \tilde{\mathbf{g}} + \tilde{\mathbf{g}} \tilde{\mathbf{v}} \mathbf{G}, \quad (4.1.41)$$

em que

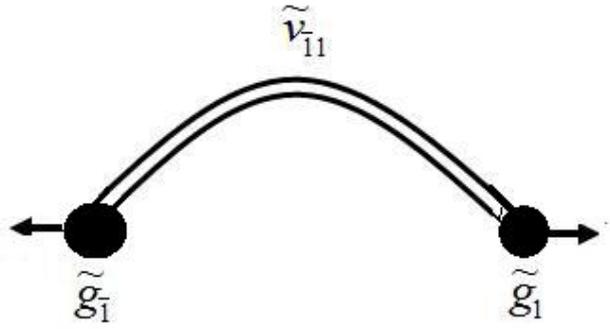


Figura 4.7 – superfícies renormalizadas conectadas.

$$\tilde{\mathbf{G}} = \begin{bmatrix} G_{11} & G_{1\bar{1}} \\ G_{\bar{1}1} & G_{\bar{1}\bar{1}} \end{bmatrix}, \quad (4.1.42)$$

$$\tilde{\mathbf{g}} = \begin{bmatrix} \tilde{g}_{\bar{1}} & 0 \\ 0 & \tilde{g}_1 \end{bmatrix}, \quad (4.1.43)$$

e

$$\tilde{\mathbf{v}} = \begin{bmatrix} 0 & \tilde{v}_{\bar{1}1} \\ \tilde{v}_{1\bar{1}} & 0 \end{bmatrix}. \quad (4.1.44)$$

Podemos reagrupar a expressão (4.1.41), obtendo uma nova forma da expressão matricial de Dyson:

$$\mathbf{G} = (\tilde{\mathbf{g}}^{-1} - \tilde{\mathbf{v}})^{-1}. \quad (4.1.45)$$

Usando as matrizes (4.1.43) e (4.1.44), chegamos à matriz

$$\tilde{\mathbf{g}}^{-1} - \tilde{\mathbf{v}} = \begin{bmatrix} \tilde{g}_{\bar{1}}^{-1} & -\tilde{v}_{\bar{1}1} \\ -\tilde{v}_{1\bar{1}} & \tilde{g}_1^{-1} \end{bmatrix}. \quad (4.1.46)$$

Podemos chegar aos elementos de \mathbf{G} simplesmente invertendo a matriz (4.1.46)

$$\mathbf{G} = \frac{1}{\Delta} \begin{bmatrix} \tilde{g}_{\bar{1}}^{-1} & \tilde{v}_{\bar{1}1} \\ \tilde{v}_{1\bar{1}} & \tilde{g}_1^{-1} \end{bmatrix}. \quad (4.1.47)$$

em que definimos

$$\begin{aligned} \Delta &= \tilde{g}_{\bar{1}}^{-1} \tilde{g}_1^{-1} - \tilde{v}_{\bar{1}1}^2 \\ &= (\hbar\omega - \varepsilon_{\bar{1}} - \Sigma_e - \Sigma_{\bar{1}})(\hbar\omega - \varepsilon_1 - \Sigma_d - \Sigma_1) - \tilde{v}_{\bar{1}1}^2. \end{aligned} \quad (4.1.48)$$

O elemento $G_{\bar{1}1}$ é importante, já que, como veremos, a transmitância e a corrente são proporcionais a $|G_{\bar{1}1}|^2$. Este elemento da matriz (4.1.47) pode ser visto da forma explícita, usando as expressões (4.1.35) e (4.1.36).

$$G_{\bar{1}1} = \frac{\tilde{v}_{\bar{1}1}}{\Delta}. \quad (4.1.49)$$

4.2 Expressão da corrente em termos da função de Green

Nesta seção, deduziremos a corrente eletrônica na HDB em termos das funções de Green. Esta corrente é deduzida no modelo unidimensional [Guarnieri 2011] e será posteriormente estendida para o caso em que ocorre emissão de fônons e transmitância interníveis de Landau. Em alguns estágios dos cálculos precisaremos das relações de Keldysh fora do equilíbrio desenvolvidos no capítulo 3 e expressaremos a energia total do sistema por $E = \hbar\omega$.

A expressão (2.4.10) mostra a corrente média em termos da média dos operadores criação a aniquilação.

$$\bar{I} = \langle I \rangle = \frac{ev}{i\hbar} \left[\langle c_j^\dagger c_{j-1} \rangle - \langle c_{j-1}^\dagger c_j \rangle \right]. \quad (4.2.1)$$

A conexão com o formalismo das funções de Green aparece pois o valor médio $\langle c_i^\dagger c_j \rangle$ está relacionado com a função de Green menor $G^<(t', t)$.

$$G_{i,j}^<(t', t) = i \langle c_j^\dagger(t) c_i(t') \rangle. \quad (4.2.2)$$

No estado estacionário, a função de Green menor depende da diferença $\tau = t - t'$ e pode ser expressa em termos de uma transformada de Fourier no domínio da energia E .

$$G_{i,j}^<(\tau) = i \langle c_j^\dagger(\tau) c_i(0) \rangle = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dE G_{i,j}^<(E) e^{-iE\tau/\hbar}. \quad (4.2.3)$$

Quando os operadores criação e aniquilação atuam no mesmo tempo, temos que em $\tau = 0$ a expressão (4.2.1) fica :

$$\bar{I} = \frac{ev}{h} \int_{-\infty}^{\infty} dE \left[G_{j-1,j}^<(E) - G_{j,j-1}^<(E) \right]. \quad (4.2.4)$$

Como a corrente média independe dos planos entre os quais está sendo medida, teremos:

$$\bar{I} = \frac{ev}{h} \int_{-\infty}^{\infty} dE \left[G_{\bar{2},\bar{1}}^<(E) - G_{\bar{1},\bar{2}}^<(E) \right], \quad (4.2.5)$$

onde 1 e $\bar{1}$ representam a região de espalhamento renormalizados e reconectados, já 2 e $\bar{2}$ são as semicadeias direita e esquerda renormalizadas.

Para explicitar os termos do integrando, usaremos (3.2.23), em que o produto de matrizes se transforma em produto de integrais em $(d\mathbf{r}, d\tau)$. Desta maneira, na representação tight-binding, a equação de Dyson pode ser expressa:

$$\mathbf{G} = \mathbf{g} + \mathbf{g}\Sigma\mathbf{G}, \quad (4.2.6)$$

ou

$$\mathbf{G} = \mathbf{g} + \mathbf{G}\Sigma\mathbf{g}. \quad (4.2.7)$$

Pode-se aplicar (3.2.35) para efetuar os produtos entre as funções, supondo que as integrais são efetuadas no contorno C .

$$\mathbf{G}^< = \mathbf{g}^< + \mathbf{g}^<\Sigma^a\mathbf{G}^a + \mathbf{g}^r\Sigma^r\mathbf{G}^< + \mathbf{g}^r\Sigma^<\mathbf{G}^a, \quad (4.2.8)$$

$$\mathbf{G}^< = \mathbf{g}^< + \mathbf{G}^<\Sigma^a\mathbf{g}^a + \mathbf{G}^r\Sigma^r\mathbf{g}^< + \mathbf{G}^r\Sigma^<\mathbf{g}^a. \quad (4.2.9)$$

Considerando o caso da reconexão sem interações temos:

$$\Sigma^< = 0. \quad (4.2.10)$$

$$\mathbf{g}^< = \begin{bmatrix} g_2^< & 0 \\ 0 & g_1^< \end{bmatrix}, \quad (4.2.11)$$

$$\Sigma^a = \Sigma^r = \begin{bmatrix} 0 & v \\ v & 0 \end{bmatrix}. \quad (4.2.12)$$

Isto, aplicado em (4.2.8) e (4.2.9), resulta na seguinte função “menor” para a propagação entre os sítios $\bar{2}$ e $\bar{1}$:

$$G_{2\bar{1}}^< = g_{22}^<\Sigma_{2\bar{1}}^a G_{\bar{1}\bar{1}}^a + g_{22}^r\Sigma_{2\bar{1}}^r G_{\bar{1}\bar{1}}^< \quad (4.2.13)$$

$$G_{\bar{1}2}^< = G_{\bar{1}\bar{1}}^<\Sigma_{\bar{1}2}^a g_{22}^a + G_{\bar{1}\bar{1}}^r\Sigma_{\bar{1}2}^r g_{22}^<. \quad (4.2.14)$$

A diferença entre os termos fica,

$$G_{2\bar{1}}^< - G_{\bar{1}2}^< = v [G_{\bar{1}\bar{1}}^<g_2^> - g_2^<G_{\bar{1}\bar{1}}^>], \quad (4.2.15)$$

em que usamos

$$g_2^r - g_2^a = g_2^> - g_2^< \quad (4.2.16)$$

e

$$G_{\bar{1}\bar{1}}^r - G_{\bar{1}\bar{1}}^a = G_{\bar{1}\bar{1}}^> - G_{\bar{1}\bar{1}}^<. \quad (4.2.17)$$

Para determinar os termos dentro do colchete de (4.2.15), usaremos a relação de Keldysh (3.2.49).

$$G_{\bar{1}\bar{1}}^> = [(1 + G^r\Sigma^r)g^>(1 + \Sigma^a G^a)]_{\bar{1}\bar{1}}. \quad (4.2.18)$$

As funções de Green não perturbadas “maiores” e “menores” dependem explicitamente do número de buracos e do número de elétrons [Mahan 1990].

$$g_j^<(E) = in_j(E)\rho_j(E), \quad (4.2.19)$$

$$g_j^>(E) = i[1 - n_j(E)]\rho_j(E), \quad (4.2.20)$$

sendo $j = \bar{2}, 2$. Supondo que na região de espalhamento desconectada das semicadeias infinitas fig.(4.8), os sítios $\bar{1}$ e 1 se encontram completamente cheios de elétrons,

$$g_{\bar{1}}^> = g_1^> = 0 \quad (4.2.21)$$

Após a reconexão com o poço fig.(4.8) e levando em conta (4.2.21), a relação de Keldysh (4.2.18) fica:

$$\begin{aligned} G_{\bar{1}\bar{1}}^> &= G_{\bar{1}l}^r \Sigma_{lm}^r g_{mn}^> \Sigma_{nk}^a G_{k\bar{1}}^a \\ &= G_{\bar{1}\bar{1}}^r v^2 g_2^> G_{\bar{1}\bar{1}}^a + G_{\bar{1}\bar{1}}^r v^2 g_2^> G_{\bar{1}\bar{1}}^a. \end{aligned} \quad (4.2.22)$$

Sabendo que,

$$\begin{aligned} G_{\bar{1}\bar{1}}^a &= G_{\bar{1}\bar{1}}^r, \\ G_{\bar{1}\bar{1}}^a &= G_{\bar{1}\bar{1}}^r \end{aligned} \quad (4.2.23)$$

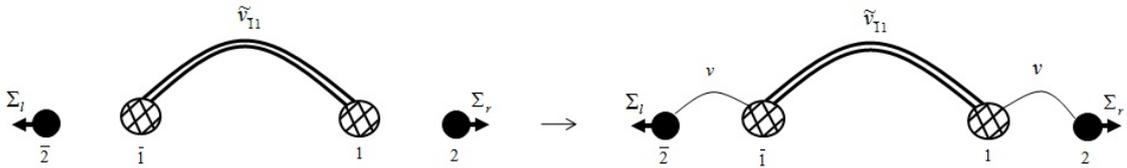


Figura 4.8 – conexão entre a região de espalhamento e as semicadeias.

e multiplicando (4.2.22) por $g_2^<$, teremos:

$$G_{\bar{1}\bar{1}}^> g_2^< = v^2 |G_{\bar{1}\bar{1}}^r|^2 g_2^> g_2^< + v^2 |G_{\bar{1}\bar{1}}^r|^2 g_2^> g_2^<. \quad (4.2.24)$$

Utilizando-se do mesmo processo e considerando $g_{\bar{1}}^> = g_1^> = 0$ teremos,

$$G_{\bar{1}\bar{1}}^< g_2^> = v^2 |G_{\bar{1}\bar{1}}^r|^2 g_2^< g_2^> + v^2 |G_{\bar{1}\bar{1}}^r|^2 g_2^< g_2^>. \quad (4.2.25)$$

Agora podemos realizar a subtração (4.2.15)

$$G_{\bar{2}\bar{1}}^< - G_{\bar{1}2}^< = v^3 |G_{\bar{1}\bar{1}}^r|^2 (g_2^< g_2^> - g_2^> g_2^<). \quad (4.2.26)$$

Substituindo (4.2.26) em (4.2.5) e aplicando as relações (4.2.19) e (4.2.20), a expressão para a corrente média do sistema fica:

$$\bar{I} = \frac{ev^4}{h} \int_{-\infty}^{\infty} dE |G_{\bar{1}\bar{1}}^r|^2 [n_e(1 - n_d) - n_d(1 - n_e)] \rho_e(E) \rho_d(E). \quad (4.2.27)$$

em que ρ_e e ρ_d são as densidades de estado das semicadeias esquerda e direita e n_e, n_d as distribuições de Fermi-Dirac. O primeiro termo dentro do colchete representa os elétrons que fluem da esquerda para a direita no sistema e o segundo termo representa o fluxo de elétrons na direção oposta. Usando a equação de Keldysh, obtivemos uma expressão para a corrente através de uma HDB fora do equilíbrio, cujos termos são definidos no equilíbrio.

4.3 Relação da função de Green com a transmitância

Consideremos o hamiltoniano eletrônico \hat{H}_e na base $|j\rangle$ e $|m\rangle$, dado por:

$$\begin{aligned} \hat{H}_e = & \sum_{j \neq 0} \left\{ \epsilon'_j c_j^\dagger c_j + v \left(c_j^\dagger c_{j-1} + c_{j-1}^\dagger c_j \right) \right\} + \sum_m E_m c_{m-1}^\dagger c_m \\ & + \sum_m \left\{ v_{m\bar{1}} \left(c_m^\dagger c_{\bar{1}} + c_{\bar{1}}^\dagger c_m \right) + v_{m1} \left(c_m^\dagger c_1 + c_1^\dagger c_m \right) \right\}, \end{aligned} \quad (4.3.1)$$

lembrando-se que j possui valores entre $-\infty, \dots, \bar{2}, \bar{1}, 1, 2, \dots, \infty$ e m entre $0', 1', \dots, N' - 1$. Através da relação de autovalores:

$$\hat{H}_e |\psi\rangle = E |\psi\rangle, \quad (4.3.2)$$

encontra-se o estado fundamental $|\psi\rangle$ do sistema a temperatura $T = 0K$, dado por:

$$|\psi\rangle = \sum_j a_j |j\rangle + \sum_m b_m |m\rangle, \quad (4.3.3)$$

em que os estados $|m\rangle$ são aqueles definidos pela expressão (4.1.20). Projetando-se a relação (4.3.2) nos vetores $|i\rangle$ que são ortogonais entre si e aos vetores $|m\rangle$, obtém-se:

$$\langle i | \hat{H}_e | \psi \rangle = E \langle i | \psi \rangle, \quad (4.3.4)$$

inserindo-se a relação de completude entre \hat{H}_e e $|\psi\rangle$, obtém-se:

$$\sum_l \langle i | \hat{H}_e | l \rangle \langle l | \psi \rangle = E \langle i | \psi \rangle, \quad (4.3.5)$$

em que os vetores $|i\rangle, |l\rangle$ podem ser iguais aos vetores $|j\rangle$ ou aos vetores $|m\rangle$. Dessa forma, as seguintes relações são encontradas:

$$\sum_l [H_{el} - E \delta_{il}] c_l = 0, \quad (4.3.6)$$

na qual

$$c_l = \begin{cases} a_l & \text{para } l = \dots, \bar{2}, \bar{1}, 1, 2, \dots \\ b_l & \text{para } l = 0', 1', 2', \dots, N' - 1. \end{cases} \quad (4.3.7)$$

As formas explícitas da relação (4.3.6), levando-se em consideração todos os estados da região de espalhamento e os seus primeiros vizinhos, são dadas por:

$$v a_{\bar{2}} + (\epsilon'_1 - E) a_{\bar{1}} + \sum_m v_{\bar{1}m} b_m = 0, \quad (4.3.8)$$

$$v_{\bar{1}m}a_{\bar{1}} + (E_m - E)b_m + v_{m1}a_1 = 0 \quad \text{em que } m = 0', 1', \dots, N' - 1, \quad (4.3.9)$$

$$\sum_m v_{m1}b_m + (\varepsilon_1' - E)a_1 + va_2 = 0. \quad (4.3.10)$$

em que $\varepsilon_1' = -2v$ e $\varepsilon_1' = -2v - U$. A função de Green não perturbada de um corpo no estado m , é dada por:

$$g_m = \frac{1}{\hbar\omega - E_m}. \quad (4.3.11)$$

Multiplicando-se a relação (4.3.9) por g_m , encontra-se:

$$v_{\bar{1}m}g_m a_{\bar{1}} - b_m + v_{m1}g_m a_1 = 0, \quad (4.3.12)$$

fazendo-se a multiplicação por $v_{\bar{1}m}$ e o somatório sobre todos os m 's na equação anterior, obtém-se:

$$\left(\sum_m v_{\bar{1}m}g_m v_{m\bar{1}} \right) a_{\bar{1}} - \sum_m v_{\bar{1}m}b_m + \left(\sum_m v_{\bar{1}m}g_m v_{m1} \right) a_1 = 0,$$

isto é:

$$\sum_m v_{\bar{1}m}b_m = \Sigma_{\bar{1}} a_{\bar{1}} + \tilde{v}_{\bar{1}1} a_1. \quad (4.3.13)$$

Analogamente, a seguinte relação é encontrada:

$$\sum_m v_{m1}b_m = \tilde{v}_{1\bar{1}} a_{\bar{1}} + \Sigma_1 a_1 \quad (4.3.14)$$

Substituindo-se as relações (4.3.13) e (4.3.14) nas expressões (4.3.8) e (4.3.10), encontra-se:

$$va_2 + (\varepsilon_1' + \Sigma_{\bar{1}} - \hbar\omega)a_{\bar{1}} + \tilde{v}_{\bar{1}1} a_1 = 0, \quad (4.3.15)$$

$$\tilde{v}_{1\bar{1}} a_{\bar{1}} + (\varepsilon_1' + \Sigma_1 - \hbar\omega)a_1 + va_2 = 0. \quad (4.3.16)$$

Nas relações (4.3.15) e (4.3.16), pode-se observar que as amplitudes b_m foram dizimadas. Para os sítios à direita $j = 1$ e $j = 2$ da região de espalhamento, as seguintes relações para os coeficientes a_j são encontradas:

$$a_j = A_T e^{ik'_z z_j} \quad \text{para } j = 1, 2 \quad (4.3.17)$$

em que k'_z é o módulo do vetor da onda transmitida na direção z , o qual satisfaz a seguinte relação de dispersão:

$$\hbar\omega - \varepsilon_1' = 2v \cos k'_z a, \quad (4.3.18)$$

e A_T é uma constante complexa da amplitude da onda transmitida cujo o módulo pode ser obtido através da normalização. Assim A_T é definida a menos de uma constante ($ce^{i\varphi}$) e consequentemente pode-se escolher em qualquer sítio à direita da dupla barreira como sendo a origem do nosso sistema. Para $z_1 = 0$, é obtido:

$$a_1 = A_T \quad (4.3.19)$$

$$a_2 = A_T e^{ik'_z a}. \quad (4.3.20)$$

Substituindo-se as relações (4.3.19) e (4.3.20) na relação (4.3.16), obtém-se:

$$a_{\bar{1}} = \frac{A_T}{\tilde{v}_{\bar{1}1}} \left[(\varepsilon'_1 + \Sigma_1 - \hbar\omega) + v e^{ik'_z a} \right] \quad (4.3.21)$$

Observe-se que $a_{\bar{1}}$ depende de A_T . Lembrando-se que a auto-energia da semi-cadeia à direita Σ_d é dada por:

$$\Sigma_d = \frac{1}{2}(\hbar\omega - \varepsilon'_1) + \frac{i}{2}\sqrt{4v^2 - (\hbar\omega - \varepsilon'_1)^2}. \quad (4.3.22)$$

para as energias que respeitam a condição, $|\hbar\omega - \varepsilon'_1| < 2v$.

O termo imaginário da eq. (4.3.22) pode ser expresso como:

$$v\sqrt{1 - \left(\frac{\hbar\omega - \varepsilon'_1}{2v}\right)^2} = v\sqrt{1 - \cos^2 k'_z a} = v \sin k'_z a. \quad (4.3.23)$$

Assim, pode-se escrever a relação (4.3.22) da seguinte maneira,

$$\Sigma_d = v(\cos k'_z a + i \sin k'_z a) = v e^{ik'_z a}. \quad (4.3.24)$$

À esquerda da região de espalhamento as soluções para a_j são dadas por:

$$a_j = A_I e^{ik_z z_j} + A_R e^{-k_z z_j}. \quad (4.3.25)$$

se k_z satisfaz a relação de dispersão à esquerda:

$$\hbar\omega - \varepsilon'_1 = 2v \cos k_z a. \quad (4.3.26)$$

Analogamente, a auto-energia da semi-cadeia à esquerda pode ser expressa como:

$$\Sigma_e = v e^{ik_z a}. \quad (4.3.27)$$

Das equações (4.3.24) e (4.3.21), obtém-se:

$$a_{\bar{1}} = -\frac{1}{\tilde{v}_{\bar{1}1}} (\varepsilon'_1 + \Sigma_e + \Sigma_d - \hbar\omega) A_T. \quad (4.3.28)$$

Substituindo-se as eqs. (4.3.28) e (4.3.19) na relação (4.3.15), obtém-se:

$$v a_{\bar{2}} + (\varepsilon'_1 + \Sigma_l - \hbar\omega) \left[-\frac{1}{\tilde{v}_{\bar{1}1}} (\varepsilon'_1 + \Sigma_1 + \Sigma_d - \hbar\omega) \right] A_T + \tilde{v}_{\bar{1}1} A_T = 0. \quad (4.3.29)$$

Através desta relação é possível encontrar $a_{\bar{2}}$. A origem agora será escolhida à esquerda da dupla barreira em $j = \bar{1}$. Da expressão (4.3.25), obtém-se:

$$a_{\bar{1}} = A_I + A_R, \quad (4.3.30)$$

$$a_2 = A_I e^{-ik_z a} + A_R e^{ik_z a}. \quad (4.3.31)$$

Através do sistema de equações (4.3.28), (4.3.29), (4.3.30) e (4.3.31), é possível calcular A_I e A_R em função de A_T . Consequentemente, os coeficientes de Fresnel de transmissão t e reflexão r podem ser obtidos através das relações,

$$t = \frac{A_T}{A_I}, \quad (4.3.32)$$

$$r = \frac{A_R}{A_I}. \quad (4.3.33)$$

A transmitância T e a reflectância R estão relacionadas a estes coeficientes das seguintes formas:

$$T = |t|^2 \quad (4.3.34)$$

$$R = |r|^2 \quad (4.3.35)$$

Para a obtenção de A_I em função de A_T , a eq. (4.3.30) foi multiplicada por $e^{ik_z a}$ e, em seguida, subtraída por (4.3.31):

$$e^{ik_z a} a_1 - a_2 = A_I (e^{ik_z a} - e^{-ik_z a}),$$

ou

$$A_I = \frac{ve^{ik_z a} a_1 - va_2}{2iv \sin k_z a}. \quad (4.3.36)$$

Utilizando-se da eq. (4.3.27), pode-se escrever (4.3.15) da seguinte forma:

$$ve^{ik_z a} a_1 - va_2 = (\epsilon'_1 - \hbar\omega + \Sigma_1 + \Sigma_e) a_1 + \tilde{v}_{11} a_1. \quad (4.3.37)$$

Substituindo-se as eqs. (4.3.19) e (4.3.28) em (4.3.37), obtém-se:

$$ve^{ik_z a} a_1 - va_2 = -\frac{1}{\tilde{v}_{11}} [(\epsilon'_1 - \hbar\omega + \Sigma_1 + \Sigma_e)(\epsilon'_1 + \Sigma_1 + \Sigma_d - \hbar\omega) - \tilde{v}_{11}^2] A_T. \quad (4.3.38)$$

Observe-se que a relação entre o colchete da eq. (4.3.38) é o determinante da matriz (4.1.47), isto é, o delta (Δ) da relação (4.1.48), Dessa forma encontra-se:

$$ve^{ik_z a} a_1 - va_2 = -\frac{\Delta}{\tilde{v}_{11}} A_T. \quad (4.3.39)$$

Consequentemente das relações (4.3.36) e (4.3.39) são obtidas:

$$A_I = -\frac{\Delta}{2iv\tilde{v}_{11} \sin k_z a} A_T. \quad (4.3.40)$$

Logo, o seguinte coeficiente de Fresnel da transmitância é obtido:

$$t = \frac{A_T}{A_I} = 2iv \sin k_z a \left(\frac{-\tilde{v}_{11}}{\Delta} \right). \quad (4.3.41)$$

Observe-se que a relação dentro do parêntese da equação acima é a mesma dada pela expressão (4.1.49). Dessa maneira, a seguinte relação para a transmitância é encontrada:

$$T = |t|^2 = |(2v \sin k_z a) G_{\bar{1}1}|^2. \quad (4.3.42)$$

Todavia, à esquerda da região de espalhamento, a seguinte equação para a velocidade de grupo dos elétrons v_g é dada a partir da relação de dispersão (4.3.26),

$$v_g = \frac{d\omega}{dk_z} = -\frac{2va}{\hbar} \sin k_z a, \quad (4.3.43)$$

Assim a expressão (4.3.42) se reduz a:

$$T = \left| \frac{\hbar v_g}{a} G_{\bar{1}1} \right|^2 = \left| \frac{\hbar}{\tau} G_{\bar{1}1} \right|^2, \quad (4.3.44)$$

a partir da qual é obtida a dependência existente entre a transmitância (T) dos elétrons na dupla barreira e a função de Green retardada, que descreve a propagação entre os sítios renormalizados $\bar{1}$ e 1 calculada anteriormente. O parâmetro τ é o tempo em que os elétrons, com velocidade v_g , demoram para percorrer o parâmetro de rede a à esquerda da HDB.

4.4 Corrente unidimensional com campo magnético

Consideremos nosso sistema em que a função de Green retardada na forma matricial é escrita por:

$$G^r(E) = \left[E\hat{I} - H'_e \right]^{-1} \quad (4.4.1)$$

em que H'_e é o hamiltoniano eletrônico da HDB dado por:

$$H'_e = E_l \hat{I} + H_e^0. \quad (4.4.2)$$

A energia total ($E = \hbar\omega$) do nosso sistema tem contribuição eletrônica (E') e também da energia ciclotron ($\hbar\omega_c$), devido a aplicação do campo magnético. Então,

$$E = \hbar\omega = E' + l\hbar\omega_c \quad (4.4.3)$$

Substituindo a relação (4.4.3) e (4.4.2) na função de Green retardada (4.4.1), temos:

$$\begin{aligned} G^r(\hbar\omega) &= \left[(E' + l\hbar\omega_c) \hat{I} - H'_e \right]^{-1} \\ &= \left[E' \hat{I} + l\hbar\omega_c \hat{I} - l\hbar\omega_c \hat{I} - H_e^0 \right]^{-1} \\ &= \left[E' \hat{I} - H_e^0 \right]^{-1} = G^r(E'). \end{aligned} \quad (4.4.4)$$

Considerando a igualdade (4.4.4), torna-se possível a mudança de variável $\hbar\omega \rightarrow E'$ na corrente média do sistema (4.2.27) pois,

$$G_{11}^r(\hbar\omega) = G_{11}^r(E') \quad (4.4.5)$$

$$\rho_e(\hbar\omega) = -2\text{Im}\{G_e(\hbar\omega)\} = -2\text{Im}\{G_e(E')\} = \rho_e(E') \quad (4.4.6)$$

$$\rho_d(\hbar\omega) = \rho_d(E'). \quad (4.4.7)$$

Aplicando tais mudanças teremos, a partir de (4.2.27), que a corrente unidimensional através da HDB fica:

$$\bar{I} = \frac{ev^4}{h} \int_{-\infty}^{\infty} dE' |G_{11}^r(E')|^2 [n_e(1-n_d) - n_d(1-n_e)] \rho_e(E') \rho_d(E'). \quad (4.4.8)$$

Podemos notar a dependência explícita dos níveis de Landau l nas distribuições de Fermi-Dirac à esquerda e à direita, já que:

$$n_e = \frac{1}{e^{\beta(E'+l\hbar\omega_c - E_F^e)} + 1} \quad (4.4.9)$$

e

$$n_d = \frac{1}{e^{\beta(E'+l'\hbar\omega_c - E_F^d)} + 1}. \quad (4.4.10)$$

O termo dentro do colchete da expressão (4.4.8) pode ser escrito de forma simplificada, já que:

$$n_e(1-n_d) - n_d(1-n_e) = n_e - n_d.$$

A corrente total leva em consideração os estados ocupados

$$I_t = \sum_{est.ocup.} \bar{I} = \frac{S}{a^2} \bar{I},$$

em que S é a área total e a é o parâmetro de rede. A expressão da corrente unidimensional dependente da função de Green retardada fica:

$$I_t = \frac{eSv^4}{ha^2} \int_{-\infty}^{\infty} dE' |G_{11}^r(E')|^2 [n_e - n_d] \rho_e(E') \rho_d(E'). \quad (4.4.11)$$

CAPÍTULO 5

Magnetotunelamento

Neste capítulo serão calculadas as funções de Green e a corrente unidimensional de uma HDB levando em conta a interação elétron-fônon com um campo magnético aplicado paralelo à corrente. Para isso usaremos os níveis de Landau l e os canais de fônons f .

Ao interagir elétrons e fônons, novos canais são abertos onde os elétrons podem fluir. Consideraremos o problema em que apenas dois canais de fônons são relevantes, já que os outros canais terão modos evanescentes para ambos os lados cuja contribuição é mínima, pois o potencial aplicado é menor que $2(E_0 - (E_{Fe} - 2\hbar\omega_0))$, onde E_{Fe} é a energia de Fermi à esquerda. Designamos estes canais por $f = 0$ quando não ocorre emissão de fônon durante o tunelamento e $f = 1$ quando ocorre a emissão de um fônon de energia $\hbar\omega_0$, como se pode observar na figura (1.10).

Ao aplicar um campo magnético forte paralelo à corrente, os níveis de energia do emissor e os estados poço quântico são quantizados em níveis de Landau com energia dada pela expressão (1.4.1). Para um sistema sem imperfeições ou desordem, o tunelamento entre níveis de Landau diferentes não é permitido, pois quebra a regra de seleção em que $\Delta l = 0$. Porém, quando é considerada a emissão de fônons LO no tunelamento, observa-se picos ressonantes associados as transições entre níveis de Landau, que mostra a quebra da regra de seleção. Isto pode ser visto em alguns trabalhos teóricos e experimentais, em que observam-se alguns picos ressonantes no tunelamento assistido por fônons entre níveis de Landau, como mostrou G.S.Boebing no trabalho [Boebinger et al. 1990] (ver figura (5.1)). Tais transições podem ser vistas para temperaturas finitas [Zou, Chao e Galperin 1993], onde na curva da transmitância em função da energia, o pico principal é marcado pela letra M e a absorção e emissão de fônons interníveis de Landau são marcadas pela letra A e E, respectivamente (ver figura (5.2)). Alguns trabalhos teóricos [Paredes, Rios e Arce 2016, Vandenberghe et al. 2011] utilizaram o formalismo de Keldysh fora do equilíbrio para estudar o transporte eletrônico em heteroestruturas no magnetotunelamento.

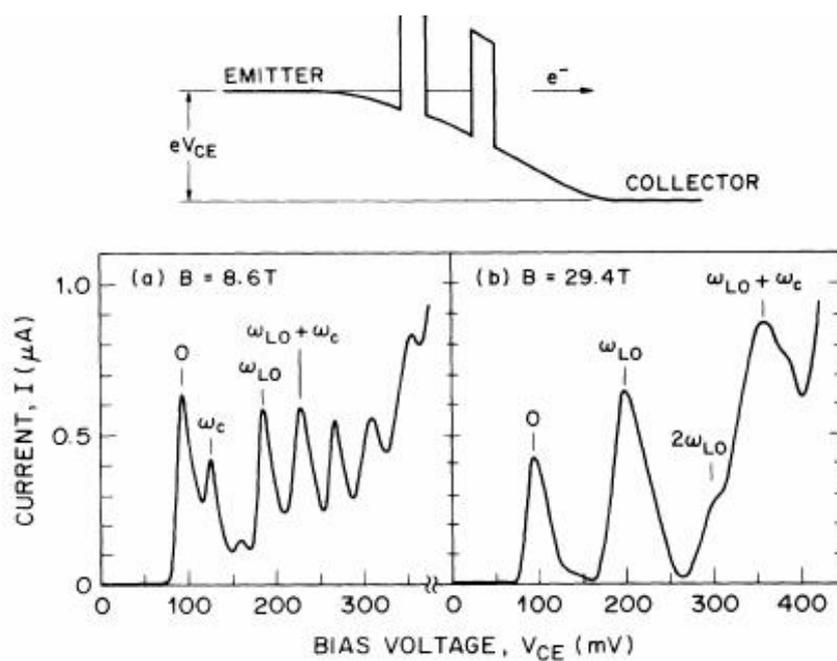


Figura 5.1 – Resultados que mostram picos ressonantes entre níveis de Landau [Boebinger et al. 1990].

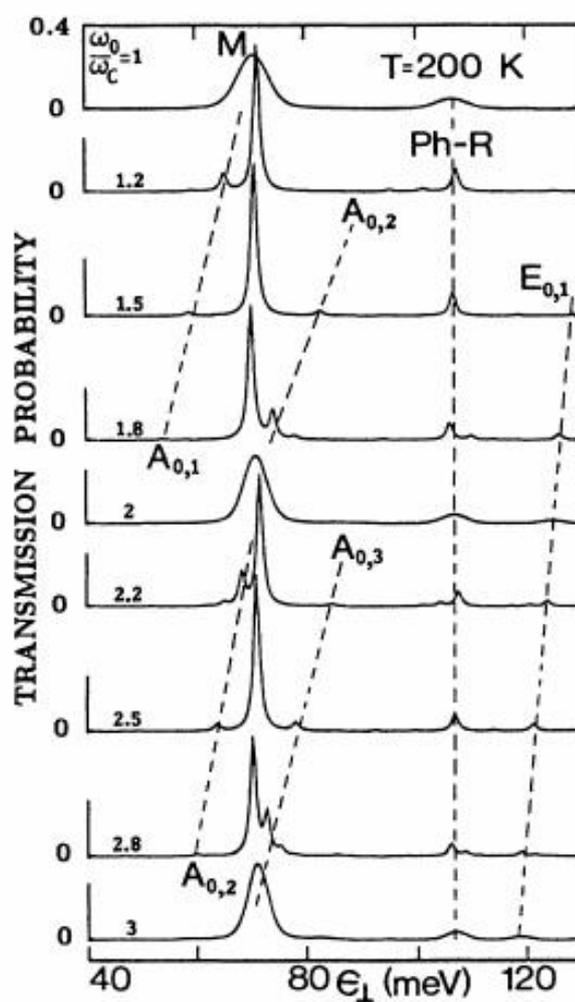


Figura 5.2 – Transmitância em função da energia onde podem ser vistos picos ressonantes correspondentes as transições entre níveis de Landau [Zou, Chao e Galperin 1993]

Trabalhos como o de [Eaves, Hayden e Leadbeater 1992] mostram o aparecimento de picos ressonantes correspondentes às transições eletrônicas entre níveis de Landau, ver figura (5.3).

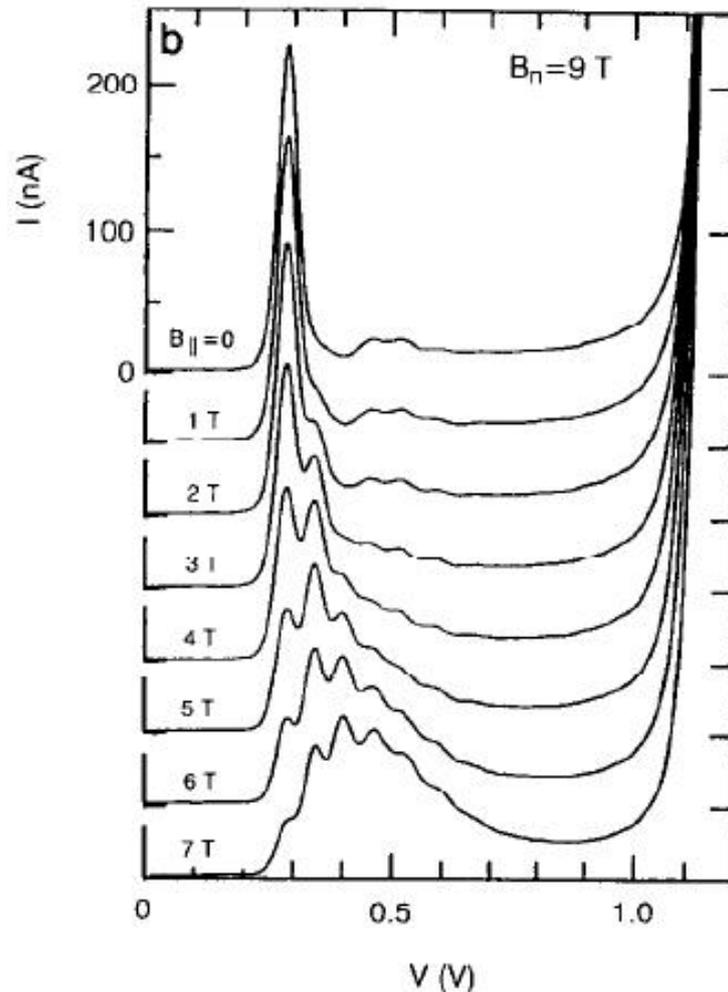


Figura 5.3 – Curva $I(V)$ em que aparecem picos devido às mudanças de níveis de Landau [Eaves, Hayden e Leadbeater 1992].

No modelo proposto neste trabalho, supomos a transição entre dois níveis de Landau para dois canais de fônons.

O elétron entra pela esquerda somente pelo canal sem emissão de fônon ($f = 0$) com energia ciclotron $\hbar\omega_c < E_{Fe}$, em que teremos dois níveis de Landau ($l = 0$ ou $l = 1$) ocupados no emissor. Para o caso em que $l = 0$ no emissor e $l = 0$ no poço, o elétron pode tunelar sem emissão de fônons em $f = 0$ (fig. (5.4a)), ou emitir um fônon LO_1 no poço com energia $\hbar\omega_0$ e deixar a HDB pelo canal $f = 1$ (fig. (5.4b)). Para o caso em que $l = 1$ no emissor e $l = 1$ no poço, o elétron pode tunelar sem emissão de fônons em $f = 0$ (fig. (5.4c)), ou emitir um fônon LO_1 no poço com energia $\hbar\omega_0$ e deixar a HDB pelo canal $f = 1$ (fig. (5.4d)). Porém, podem ocorrer transições entre diferentes níveis de Landau. O elétron pode trocar de nível Landau, de $l = 0$ para $l' = 1$, emitindo um fônon LO_1 e saindo pelo canal $f' = 1$ (fig. (5.5a)). De outra

maneira, o elétron pode trocar de nível de Landau, $l = 0$ para $l' = 1$, emitindo um fônon LO_1 e logo em seguida absorve um fônon LO_1 , no mesmo nível de Landau, e sai pelo canal $f' = 0$ (fig. (5.5b)). De forma semelhante, o elétron pode permanecer no mesmo nível de Landau $l = 0$ emitindo um fônon LO_1 e em seguida absorver um fônon LO_1 e trocar de nível de Landau $l = 0$ para $l' = 1$, saindo pelo canal $f' = 0$ (fig. (5.5c)). Por último, o elétron pode trocar de nível de Landau $l = 1$ para $l' = 0$, emitindo um fônon LO_1 , e sair pelo canal $f' = 1$ (fig. (5.5d)).

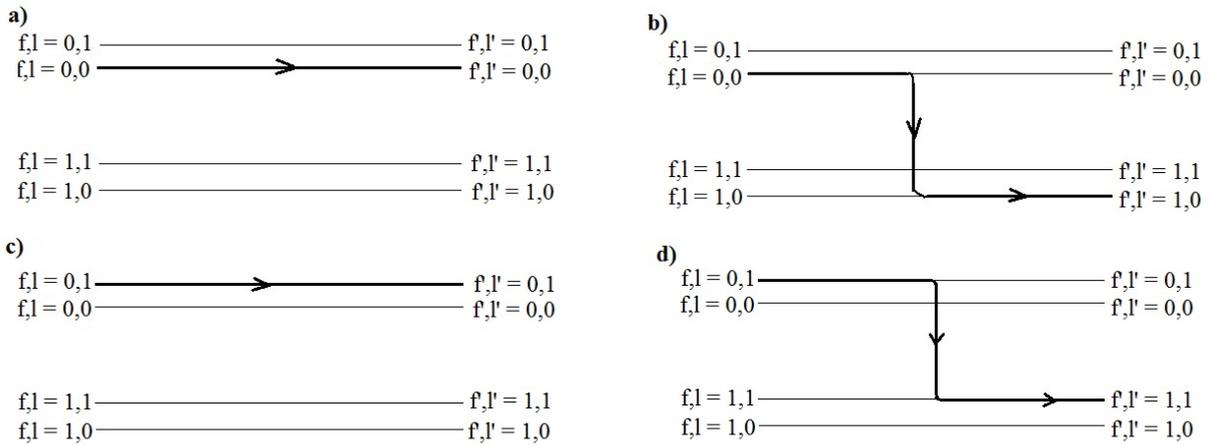


Figura 5.4 – Transições entre os mesmos níveis de Landau.

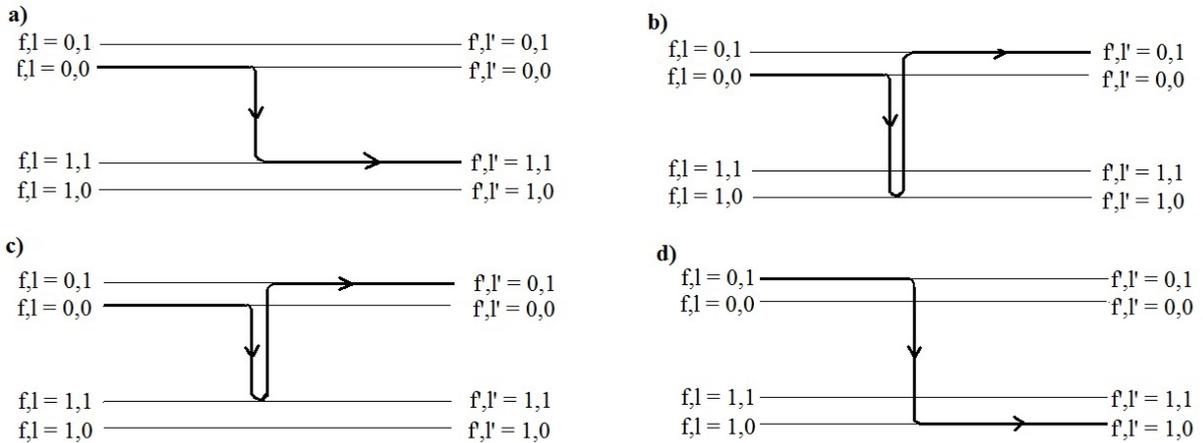


Figura 5.5 – Transições entre níveis de Landau diferentes.

No caso do tunelamento ressonante sem campo magnético ($\mathbf{B} = 0$), o momento paralelo (k_{\parallel}) à interface é conservado de forma que podemos considerá-lo como um bom número quântico. No espaço recíproco \mathbf{k} (fig. (5.7)), vemos que $k_{\parallel}^2 \leq K_F^2 - K_z^2$ e devemos somar sobre todos os estados dentro do disco para a obtenção da corrente eletrônica na HDB. A curva de dispersão da figura (5.6) mostra que para diferentes valores de energia $E = E_i + \frac{\hbar k_{\parallel}^2}{2m^*}$ dentro do poço, fônons LO podem ser emitidos tal que $\Delta E \approx \hbar\omega_0$ já que todo o disco da esfera de Fermi pode ser ocupado para um dado K_z .

Se um campo magnético é aplicado paralelo à direção da corrente $\mathbf{B} = B\hat{k}$ os estados dentro da área disco na esfera de Fermi colapsam em círculos concêntricos que representam os níveis de Landau, para um dado k_z (fig. (1.8)). Os níveis de energia neste caso são escritos como $E = E_i + (l + 1/2)\hbar\omega_c$, de forma que a curva de dispersão da HDB pode ser representada pela figura (5.8). Como a energia ciclotron é proporcional ao campo magnético, a separação entre os níveis de Landau aumenta com o aumento de \mathbf{B} no intervalo $0 < E < E_F$, logo o número de níveis de Landau diminui e os estados ocupados em cada nível aumenta. Neste trabalho consideremos o caso em que $l = 0$ ou $l = 1$.

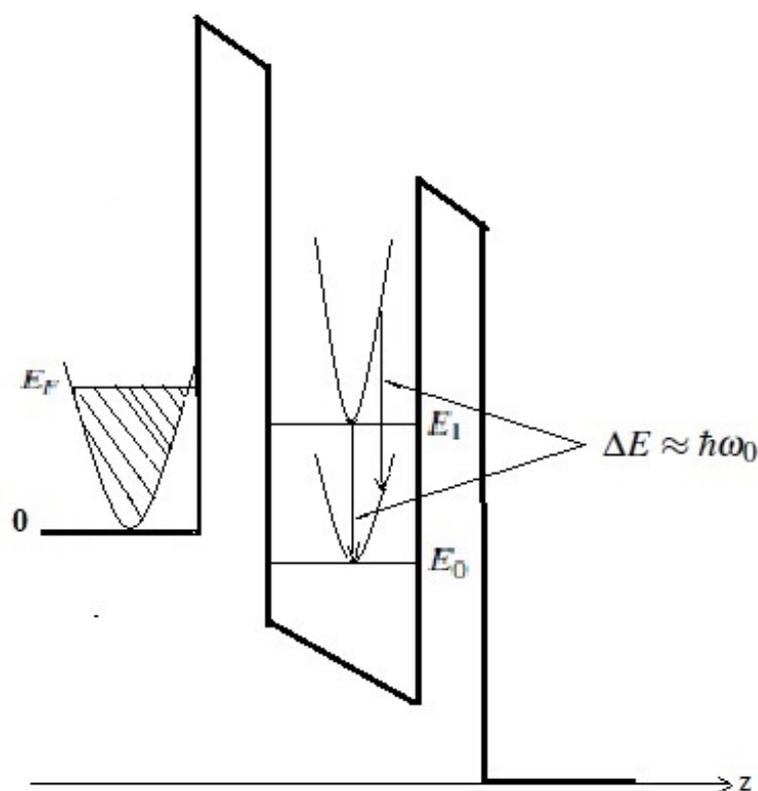


Figura 5.6 – Representação da curva de dispersão na HDB

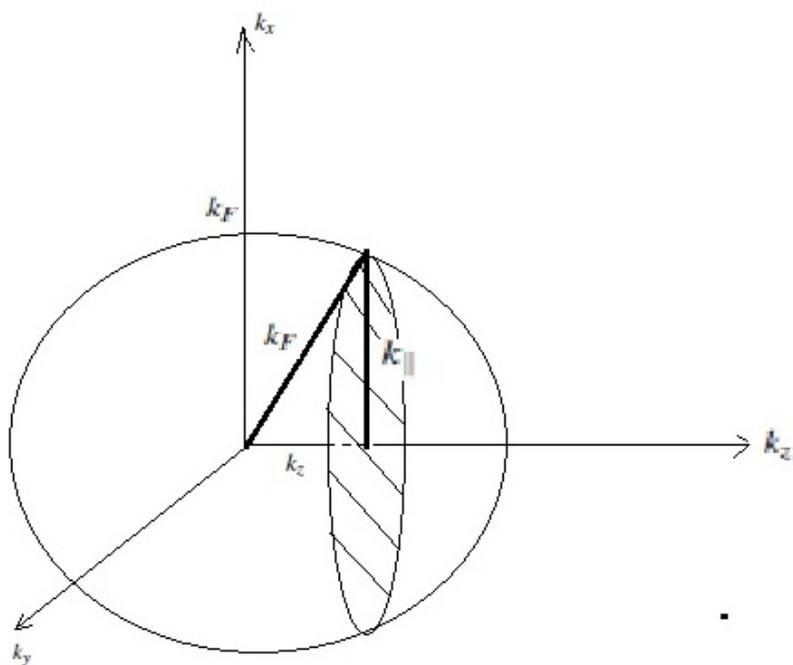


Figura 5.7 – Esfera de Fermi do espaço recíproco \mathbf{K} para $\mathbf{B} = 0$

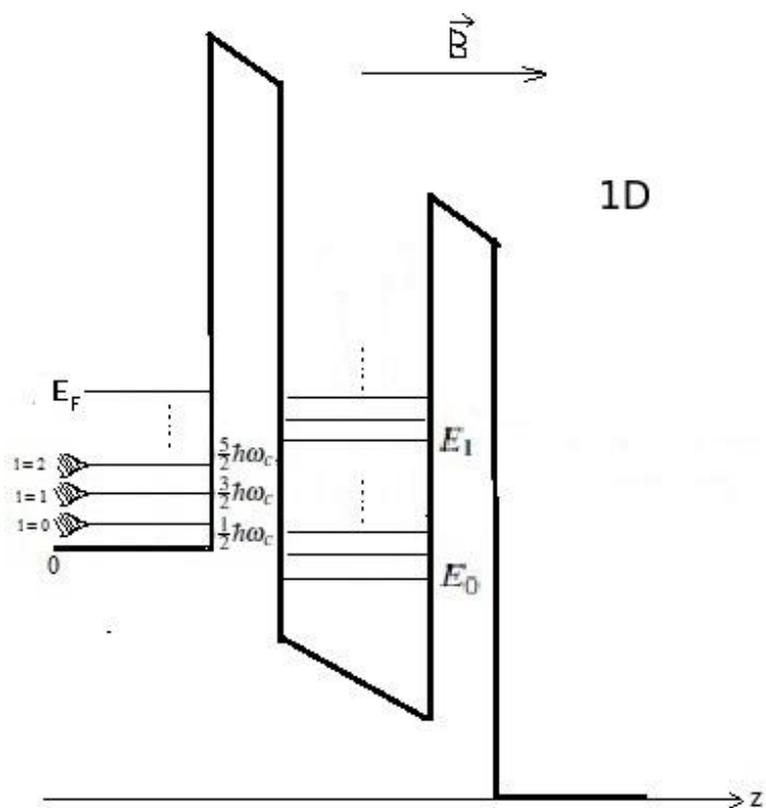


Figura 5.8 – Representação da curva de dispersão na HDB para $\mathbf{B} \neq 0$

5.1 Cálculo das funções de Green com interação elétron-fônon e campo magnético

Neste sistema consideramos dois canais fonônicos, $f = 0$ (sem emissão de fônon) e $f = 1$ (com emissão de fônon) para dois níveis de Landau $l = 0, 1$. Os estados fundamental ($m' = 0$) e excitado ($m' = 1$) conectam-se através da interação elétron-fônon, representado pelos parâmetros γ_0 e γ_1 . Esta conexão pode ocorrer intranível de Landau (no mesmo nível de Landau) ou internível de Landau (entre níveis de Landau diferentes) via parâmetros γ_{01} e γ_{10} , como veremos posteriormente. Nestes cálculos, os elétrons que emitem fônons mudam de energia e estados que participam da emissão de fônons não são dizimados. Veremos na secção (5.2) que a corrente eletrônica pode ser escrita em termos da função de Green retardada G^r . Daqui em diante omitiremos o supraíndice r da função de Green G^r .

Primeiramente, vamos calcular as funções de Green que representam os canais independentes, conforme a figura (5.9), e posteriormente conectá-los via interação elétron-fônon.

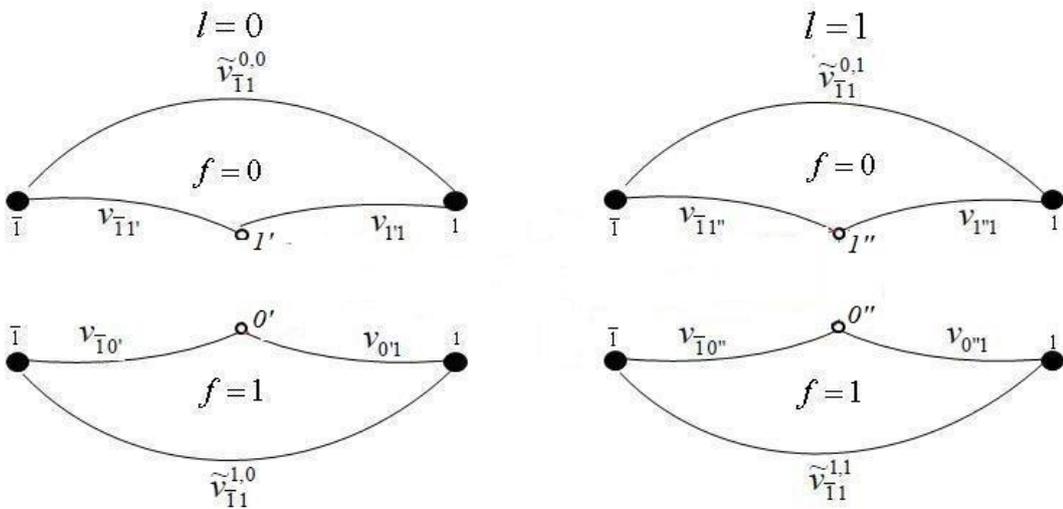


Figura 5.9 – Diagrama de canais independentes

Podemos determinar as funções de Green $\tilde{\mathbf{g}}$, para estes canais independentes, mediante a equação de Dyson:

$$\tilde{\mathbf{g}} = \mathbf{g} + \mathbf{g}\mathbf{V}\tilde{\mathbf{g}} \quad (5.1.1)$$

sendo \mathbf{g} uma matriz 12×12 (5.1.2), escrita em blocos 3×3 , $\mathbf{g}^{f,l}$, que representa as funções de Green dos sítios isolados e \mathbf{V} é uma matriz 12×12 (5.1.3), escrita em blocos 3×3 , $\mathbf{V}^{f,l}$, que

representa o ‘hopping’ entre os sítios.

$$\mathbf{g} = \begin{pmatrix} \mathbf{g}^{0,0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{g}^{1,0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{g}^{0,1} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{g}^{1,1} \end{pmatrix}, \quad (5.1.2)$$

$$\mathbf{V} = \begin{pmatrix} \mathbf{V}^{0,0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{V}^{1,0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{V}^{0,1} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{V}^{1,1} \end{pmatrix}, \quad (5.1.3)$$

onde,

$$\mathbf{g}^{f,l} = \begin{pmatrix} g_{\bar{1}}^{f,l} & 0 & 0 \\ 0 & g_i^{f,l} & 0 \\ 0 & 0 & g_1^{f,l} \end{pmatrix}, \quad (5.1.4)$$

$$\mathbf{V}^{f,l} = \begin{pmatrix} 0 & v_{\bar{1}i} & \tilde{v}_{\bar{1}\bar{1}}^{f,l} \\ v_{\bar{1}i} & 0 & v_{1i} \\ \tilde{v}_{\bar{1}\bar{1}}^{f,l} & v_{1i} & 0 \end{pmatrix}, \quad (5.1.5)$$

$$g_j^{f,l} = \frac{1}{E - \varepsilon_j' - f\hbar\omega_0 - l\hbar\omega_c - \Sigma_j^{f,l} - \tilde{\Sigma}_j^{f,l}}, \quad j = \bar{1}, 1 \quad (5.1.6)$$

$$\Sigma_j^{f,l} = \Sigma_j(E - f\hbar\omega_0 - l\hbar\omega_c), \quad (5.1.7)$$

$$g_i^{f,l} = \frac{1}{E - f\hbar\omega_0 - l\hbar\omega_c - E_i}, \quad (5.1.8)$$

$$\tilde{\Sigma}_j^{f,l} = \sum_{m \neq i} v_{jm} g_m^{f,l} v_{mj}, \quad (5.1.9)$$

$$g_m^{f,l} = \frac{1}{E - f\hbar\omega_0 - l\hbar\omega_c - E_m}, \quad (5.1.10)$$

$$\tilde{v}_{\bar{1}\bar{1}}^{f,l} = \tilde{v}_{\bar{1}\bar{1}}^{f,l} = \sum_{m \neq i} v_{\bar{1}m} g_m^{f,l} v_{m\bar{1}}, \quad (5.1.11)$$

$$i = \begin{cases} m' = 0', 1', & \text{se } l = 0 \\ m'' = 0'', 1'', & \text{se } l = 1 \end{cases}$$

sendo, novamente, $v_{\bar{1}m} = vu_{0'm}$, $v_{1m} = vu_{N'm}$, $m = 0', 1', \dots, N-1$, $\varepsilon_{\bar{1}}' = -2v$ e $\varepsilon_1' = -2v - U$. Vemos que os termos de \mathbf{g} e \mathbf{V} fora da diagonal principal são nulos, desta forma podemos escrever a matriz $\tilde{\mathbf{g}} = \tilde{\mathbf{g}}^{f,l}$, que representa a função de Green dos canais independentes,

$$\tilde{\mathbf{g}} = \begin{pmatrix} \tilde{\mathbf{g}}^{0,0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \tilde{\mathbf{g}}^{1,0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \tilde{\mathbf{g}}^{0,1} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \tilde{\mathbf{g}}^{1,1} \end{pmatrix} \quad (5.1.12)$$

Utilizando a relação (5.1.1) podemos achar os elementos de cada um dos blocos separadamente e de forma simétrica. Primeiramente acharemos os blocos cujo índice de Landau é $l = 0$ e depois apenas trocar para $l = 1$.

Para a 1ª coluna de $\tilde{\mathbf{g}}^{0,0}$ temos,

$$\begin{aligned} \tilde{g}_{\bar{1}\bar{1}}^{0,0} &= g_{\bar{1}\bar{1}}^{0,0} + g_{\bar{1}j}^{0,0} V_{jk}^{0,0} \tilde{g}_{k\bar{1}}^{0,0} \\ &= g_{\bar{1}}^{0,0} + g_{\bar{1}}^{0,0} v_{\bar{1}\bar{1}}^{0,0} \tilde{g}_{\bar{1}\bar{1}}^{0,0} + g_{\bar{1}}^{0,0} \tilde{v}_{\bar{1}\bar{1}}^{0,0} \tilde{g}_{\bar{1}\bar{1}}^{0,0} \end{aligned} \quad (5.1.13)$$

$$\tilde{g}_{\bar{1}'\bar{1}}^{0,0} = g_{\bar{1}'}^{0,0} v_{\bar{1}'\bar{1}}^{0,0} \tilde{g}_{\bar{1}\bar{1}}^{0,0} + g_{\bar{1}'}^{0,0} v_{\bar{1}'\bar{1}}^{0,0} \tilde{g}_{\bar{1}\bar{1}}^{0,0} \quad (5.1.14)$$

$$\tilde{g}_{\bar{1}\bar{1}}^{0,0} = g_{\bar{1}}^{0,0} \tilde{v}_{\bar{1}\bar{1}}^{0,0} \tilde{g}_{\bar{1}\bar{1}}^{0,0} + g_{\bar{1}}^{0,0} v_{\bar{1}\bar{1}}^{0,0} \tilde{g}_{\bar{1}\bar{1}}^{0,0}. \quad (5.1.15)$$

Substituindo a relação (5.1.15) em (5.1.14) e reagrupando os termos, obtemos:

$$\left[1 - g_{\bar{1}}^{0,0} v_{\bar{1}'\bar{1}}^{0,0} g_{\bar{1}\bar{1}}^{0,0} v_{\bar{1}\bar{1}'}^{0,0}\right] \tilde{g}_{\bar{1}'\bar{1}}^{0,0} = g_{\bar{1}'}^{0,0} \left[v_{\bar{1}'\bar{1}}^{0,0} + v_{\bar{1}'\bar{1}}^{0,0} g_{\bar{1}}^{0,0} \tilde{v}_{\bar{1}\bar{1}}^{0,0}\right] \tilde{g}_{\bar{1}\bar{1}}^{0,0}$$

ou simplesmente

$$\tilde{g}_{\bar{1}'\bar{1}}^{0,0} = g_{\bar{1}'d}^{0,0} \Sigma_{\bar{1}'\bar{1}}^{0,0} \tilde{g}_{\bar{1}\bar{1}}^{0,0}, \quad (5.1.16)$$

em que definimos

$$\Sigma_{\bar{1}'\bar{1}}^{0,0} = v_{\bar{1}'\bar{1}}^{0,0} + v_{\bar{1}'\bar{1}}^{0,0} g_{\bar{1}}^{0,0} \tilde{v}_{\bar{1}\bar{1}}^{0,0} \quad (5.1.17)$$

$$g_{\bar{1}'d}^{0,0} = \left[(g_{\bar{1}'}^{0,0})^{-1} - v_{\bar{1}'\bar{1}}^{0,0} g_{\bar{1}}^{0,0} v_{\bar{1}\bar{1}'}^{0,0} \right]^{-1}. \quad (5.1.18)$$

Da mesma forma podemos substituir (5.1.15) em (5.1.13) para obter:

$$\tilde{g}_{\bar{1},\bar{1}}^{0,0} \left(1 - g_{\bar{1}}^{0,0} \tilde{v}_{\bar{1}\bar{1}}^{0,0} g_{\bar{1}}^{0,0} \tilde{v}_{\bar{1}\bar{1}}^{0,0}\right) = g_{\bar{1}}^{0,0} + g_{\bar{1}}^{0,0} \left(v_{\bar{1}\bar{1}'}^{0,0} + \tilde{v}_{\bar{1}\bar{1}}^{0,0} g_{\bar{1}}^{0,0} v_{\bar{1},\bar{1}'}^{0,0}\right) \tilde{g}_{\bar{1}'\bar{1}}^{0,0} \quad (5.1.19)$$

$$\tilde{g}_{\bar{1}\bar{1}}^{0,0} = \frac{g_{\bar{1}}^{0,0} + g_{\bar{1}}^{0,0} \left(v_{\bar{1}\bar{1}'}^{0,0} + \tilde{v}_{\bar{1}\bar{1}}^{0,0} g_{\bar{1}}^{0,0} v_{\bar{1},\bar{1}'}^{0,0}\right) \tilde{g}_{\bar{1}'\bar{1}}^{0,0}}{g_{\bar{1}}^{0,0} \left((g_{\bar{1}}^{0,0})^{-1} - \tilde{v}_{\bar{1}\bar{1}}^{0,0} g_{\bar{1}}^{0,0} \tilde{v}_{\bar{1}\bar{1}}^{0,0}\right)} \quad (5.1.20)$$

ou ainda

$$\tilde{g}_{\bar{1}\bar{1}}^{0,0} = g_{\bar{1}d}^{0,0} + g_{\bar{1}d}^{0,0} \Sigma_{\bar{1}\bar{1}'}^{0,0} \tilde{g}_{\bar{1}'\bar{1}}^{0,0}, \quad (5.1.21)$$

em que definimos

$$\Sigma_{\bar{1}1'}^{0,0} = v_{\bar{1}1'} + \tilde{v}_{\bar{1}\bar{1}}^{0,0} g_{\bar{1}}^{0,0} v_{11'} \quad (5.1.22)$$

$$g_{\bar{1}d}^{0,0} = \left[(g_{\bar{1}}^{0,0})^{-1} - \tilde{v}_{\bar{1}\bar{1}}^{0,0} g_{\bar{1}}^{0,0} \tilde{v}_{\bar{1}\bar{1}}^{0,0} \right]^{-1}. \quad (5.1.23)$$

Finalmente, aplica-se a expressão (5.1.16) em (5.1.21) para obter o 1º elemento da 1ª coluna de $\tilde{\mathbf{g}}^{0,0}$ que depende das funções de Green dos sítios.

$$\tilde{g}_{\bar{1}\bar{1}}^{0,0} \left(1 - g_{\bar{1}d}^{0,0} \Sigma_{\bar{1}1'}^{0,0} g_{1'd}^{0,0} \Sigma_{1'\bar{1}} \right) = g_{\bar{1}d}^{0,0} \quad (5.1.24)$$

ou apenas

$$\tilde{g}_{\bar{1}\bar{1}}^{0,0} = g_{\bar{1}d}^{0,0} \quad (5.1.25)$$

em que definimos

$$g_{\bar{1}d}^{0,0} = \left[(g_{\bar{1}d}^{0,0})^{-1} - \Sigma_{\bar{1}1'}^{0,0} g_{1'd}^{0,0} \Sigma_{1'\bar{1}} \right]^{-1}. \quad (5.1.26)$$

Os outros elementos da 1ª coluna de $\tilde{\mathbf{g}}^{0,0}$ finalmente serão

$$\tilde{g}_{1'\bar{1}}^{0,0} = g_{1'd}^{0,0} \Sigma_{1'\bar{1}}^{0,0} g_{\bar{1}d}^{0,0} \quad (5.1.27)$$

$$\tilde{g}_{\bar{1}\bar{1}}^{0,0} = g_{\bar{1}}^{0,0} \tilde{v}_{\bar{1}\bar{1}}^{0,0} g_{\bar{1}d}^{0,0} + g_{\bar{1}}^{0,0} v_{\bar{1}1'}^{0,0} g_{1'd}^{0,0} \Sigma_{1'\bar{1}}^{0,0} g_{\bar{1}d}^{0,0}. \quad (5.1.28)$$

Para a 2ª coluna de $\tilde{\mathbf{g}}^{0,0}$ novamente usamos a equação de Dyson (5.1.1).

$$\tilde{g}_{1'1'}^{0,0} = g_{1'}^{0,0} + g_{1'}^{0,0} v_{1'\bar{1}}^{0,0} \tilde{g}_{\bar{1}\bar{1}}^{0,0} + g_{1'}^{0,0} v_{1'1}^{0,0} \tilde{g}_{11'}^{0,0} \quad (5.1.29)$$

$$\tilde{g}_{\bar{1}1'}^{0,0} = g_{\bar{1}}^{0,0} v_{\bar{1}1'}^{0,0} \tilde{g}_{1'1'}^{0,0} + g_{\bar{1}}^{0,0} \tilde{v}_{\bar{1}\bar{1}}^{0,0} g_{11'}^{0,0} \quad (5.1.30)$$

$$\tilde{g}_{11'}^{0,0} = g_{1'}^{0,0} v_{11'}^{0,0} \tilde{g}_{1'1'}^{0,0} + g_{1'}^{0,0} \tilde{v}_{\bar{1}\bar{1}}^{0,0} \tilde{g}_{\bar{1}\bar{1}}^{0,0}. \quad (5.1.31)$$

Substituindo (5.1.31) em (5.1.30) e usando (5.1.22), temos:

$$\tilde{g}_{\bar{1}1'}^{0,0} = g_{\bar{1}d}^{0,0} \Sigma_{\bar{1}1'}^{0,0} \tilde{g}_{1'1'}^{0,0} \quad (5.1.32)$$

Usando (5.1.31) em (5.1.29) fica,

$$\tilde{g}_{1'1'}^{0,0} = g_{1'd}^{0,0} + g_{1'd}^{0,0} \Sigma_{1'\bar{1}}^{0,0} \tilde{g}_{\bar{1}\bar{1}}^{0,0} \quad (5.1.33)$$

onde usamos (5.1.18) e definimos a relação simétrica $\Sigma_{1'\bar{1}}^{0,0} = \Sigma_{\bar{1}\bar{1}}^{0,0}$. Finalmente os elementos da 2ª coluna de $\tilde{\mathbf{g}}^{0,0}$ ficam:

$$\tilde{g}_{1'd}^{0,0} = g_{1'd}^{0,0} \quad (5.1.34)$$

$$\tilde{g}_{11'}^{0,0} = g_{1d}^{0,0} \Sigma_{11'}^{0,0} \dot{g}_{1'd}^{0,0} \quad (5.1.35)$$

$$\tilde{g}_{11'}^{0,0} = g_{1'}^{0,0} v_{11'}^{0,0} \dot{g}_{1'd}^{0,0} + g_{1'}^{0,0} \tilde{v}_{11}^{0,0} g_{1d}^{0,0} \Sigma_{11'}^{0,0} \dot{g}_{1'd}^{0,0} \quad (5.1.36)$$

em que definimos

$$g_{1'd}^{0,0} = \left[(g_{1'd}^{0,0})^{-1} - \Sigma_{11'}^{0,0} g_{1d}^{0,0} \Sigma_{11'}^{0,0} \right]^{-1}. \quad (5.1.37)$$

Para terceira coluna de $\tilde{\mathbf{g}}^{0,0}$ teremos o mesmo procedimento.

$$\tilde{g}_{11}^{0,0} = g_{1'}^{0,0} + g_{1'}^{0,0} v_{11'}^{0,0} \tilde{g}_{1'1}^{0,0} + g_{1'}^{0,0} \tilde{v}_{11}^{0,0} g_{11}^{0,0} \quad (5.1.38)$$

$$\tilde{g}_{1'1}^{0,0} = g_{1'}^{0,0} v_{1'1}^{0,0} \tilde{g}_{11}^{0,0} + g_{1'}^{0,0} v_{1'1}^{0,0} \tilde{g}_{11}^{0,0} \quad (5.1.39)$$

$$\tilde{g}_{11}^{0,0} = g_{1'}^{0,0} v_{11'}^{0,0} \tilde{g}_{1'1}^{0,0} + g_{1'}^{0,0} \tilde{v}_{11}^{0,0} \tilde{g}_{11}^{0,0}, \quad (5.1.40)$$

substituindo (5.1.40) em (5.1.39) temos:

$$\tilde{g}_{1'1}^{0,0} = g_{1'e}^{0,0} \Sigma_{1'1}^{0,0} \tilde{g}_{11}^{0,0} \quad (5.1.41)$$

em que definimos

$$g_{1'e}^{0,0} = \left[(g_{1'e}^{0,0})^{-1} - v_{1'1}^{0,0} g_{11}^{0,0} v_{11'}^{0,0} \right]^{-1}. \quad (5.1.42)$$

e

$$\Sigma_{1'1}^{0,0} = v_{1'1}^{0,0} + v_{1'1}^{0,0} g_{11}^{0,0} v_{11'}. \quad (5.1.43)$$

Sabendo da relação simétrica $\Sigma_{11'}^{0,0} = \Sigma_{1'1}^{0,0}$ e substituindo (5.1.40) em (5.1.38) fica:

$$\tilde{g}_{11}^{0,0} = g_{1e}^{0,0} + g_{1e}^{0,0} \Sigma_{11'}^{0,0} \tilde{g}_{1'1}^{0,0}, \quad (5.1.44)$$

que resulta, finalmente, nos elementos da terceira coluna de $\tilde{\mathbf{g}}^{0,0}$:

$$\tilde{g}_{11}^{0,0} = g_{1e}^{0,0} \quad (5.1.45)$$

$$\tilde{g}_{1'1}^{0,0} = g_{1'e}^{0,0} \Sigma_{1'1}^{0,0} g_{1e}^{0,0} \quad (5.1.46)$$

$$\tilde{g}_{11}^{0,0} = g_{1'}^{0,0} v_{11'}^{0,0} g_{1'e}^{0,0} \Sigma_{1'1}^{0,0} g_{1e}^{0,0} + g_{1'}^{0,0} \tilde{v}_{11}^{0,0} g_{1e}^{0,0}, \quad (5.1.47)$$

em que definimos

$$g_{1'e}^{0,0} = \left[(g_{1'e}^{0,0})^{-1} - \Sigma_{1'1}^{0,0} g_{1'e}^{0,0} \Sigma_{1'1}^{0,0} \right]^{-1}$$

e $g_{1'e}^{0,0}$ é similar a $g_{1'e}^{0,0}$ trocando 1' por 1 em (5.1.42).

Todos os elementos de $\tilde{\mathbf{g}}^{1,0}$ podem ser determinados apenas trocando, nos elementos de $\tilde{\mathbf{g}}^{0,0}$, o 1º índice superior de $f = 0$ para $f = 1$ e os índices inferiores de $1'$ para $0'$. Para determinar os elementos de $\tilde{\mathbf{g}}^{0,1}$ trocamos $l = 0$ para $l = 1$ e $1'$ por $1''$ nos termos de $\tilde{\mathbf{g}}^{0,0}$ e, também os elementos de $\tilde{\mathbf{g}}^{1,1}$ trocando de $f = 0$ para $f = 1$, $l = 0$ em $l = 1$ e $1'$ em $0''$ no elementos de $\tilde{\mathbf{g}}^{0,0}$.

Vamos determinar as funções de Green \mathbf{G} dos canais conectados via interação elétron-fônon (fig.(5.10)) sem levar em conta as conexões entre os níveis de Landau.

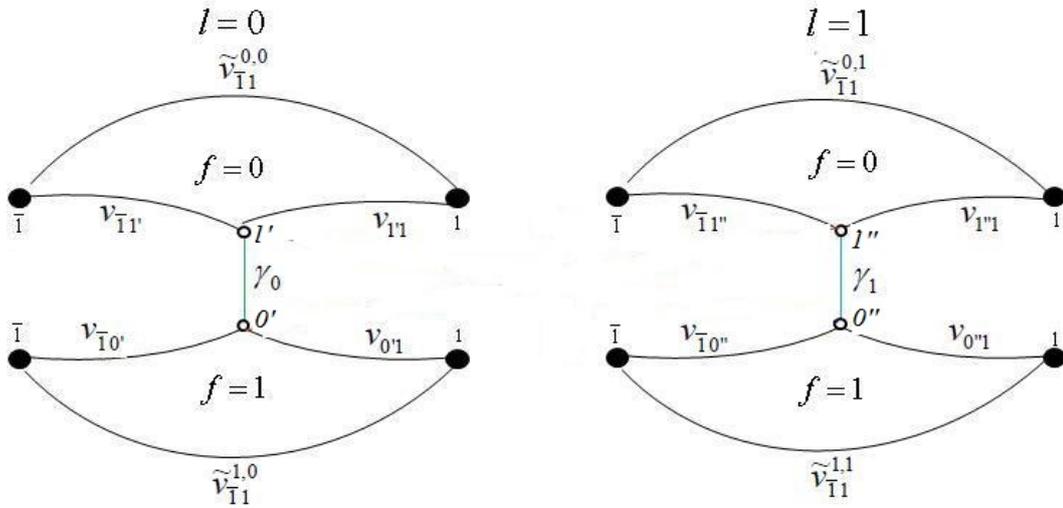


Figura 5.10 – Representação da HDB pra o cálculo de funções de Green com interação elétron-fônon

Para isso usaremos a equação de Dyson com a interação \mathbf{V}_s que conecta os canais com e sem emissão de fônon $f = 1$ e $f = 0$.

$$\mathbf{G} = \tilde{\mathbf{g}} + \tilde{\mathbf{g}}\mathbf{V}_s\mathbf{G}. \quad (5.1.48)$$

Os elementos da matriz \mathbf{G} são $G_{i,j}^{f,f',ll'}$, em que $f, f' = 0, 1$ (canais de fônons) e $l, l' = 0, 1$ (níveis de Landau). Esta matriz 12×12 é dada por blocos 3×3 , da seguinte forma:

$$\mathbf{G} = \begin{pmatrix} \mathbf{G}^{00,00} & \mathbf{G}^{01,00} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{G}^{10,00} & \mathbf{G}^{11,00} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{G}^{00,11} & \mathbf{G}^{01,11} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{G}^{10,11} & \mathbf{G}^{11,11} \end{pmatrix}, \quad (5.1.49)$$

em que a matriz 12×12 interação \mathbf{V}_s na equação (5.1.48) são, também, dadas por blocos 3×3 .

$$\mathbf{V}_s = \begin{pmatrix} \mathbf{0} & \mathbf{V}_{00} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{V}_{00} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{V}_{11} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{V}_{11} & \mathbf{0} \end{pmatrix} \quad (5.1.50)$$

em que

$$\mathbf{V}_{00} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & \gamma_{00} & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \mathbf{V}_{11} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & \gamma_{11} & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (5.1.51)$$

Voltando a expressão (5.1.48), podemos determinar os elementos dos blocos para $l, l' = 0, 0$.

$$\mathbf{G}^{00,00} = \tilde{\mathbf{g}}^{0,0} + \tilde{\mathbf{g}}^{0,0} \mathbf{V}_{00} \mathbf{G}^{10,00}, \quad (5.1.52)$$

$$\mathbf{G}^{11,00} = \tilde{\mathbf{g}}^{1,0} + \tilde{\mathbf{g}}^{1,0} \mathbf{V}_{00} \mathbf{G}^{01,00}, \quad (5.1.53)$$

$$\mathbf{G}^{10,00} = \tilde{\mathbf{g}}^{1,0} \mathbf{V}_{00} \mathbf{G}^{00,00}. \quad (5.1.54)$$

A matriz $\mathbf{G}^{10,00}$ é similar à sua transposta $\mathbf{G}^{01,00}$ em relação aos índices de fônons (f, f') e ao índices dos sítios (i, j), ou seja, $\mathbf{G}_{ij}^{10,00} = \mathbf{G}_{ji}^{01,00}$. Para os elementos dos blocos de \mathbf{G} em que $l, l' = 1, 1$, temos:

$$\mathbf{G}^{00,11} = \tilde{\mathbf{g}}^{0,1} + \tilde{\mathbf{g}}^{0,1} \mathbf{V}_{11} \mathbf{G}^{10,11}. \quad (5.1.55)$$

$$\mathbf{G}^{10,11} = \tilde{\mathbf{g}}^{1,1} \mathbf{V}_{11} \mathbf{G}^{00,11}. \quad (5.1.56)$$

$$\mathbf{G}^{11,11} = \tilde{\mathbf{g}}^{1,1} + \tilde{\mathbf{g}}^{1,1} \mathbf{V}_{11} \mathbf{G}^{01,11}. \quad (5.1.57)$$

Lembrando que $\mathbf{G}_{ij}^{10,11} = \mathbf{G}_{ji}^{01,11}$. A primeira coluna dos elementos não-nulos de \mathbf{G} em termos dos índices inferiores será:

$$G_{\bar{1}\bar{1}}^{00,00} = \tilde{g}_{\bar{1}\bar{1}}^{0,0} + \tilde{g}_{\bar{1}\bar{1}'}^{0,0} \gamma_{00} G_{0'\bar{1}}^{10,00}, \quad (5.1.58)$$

$$G_{1'\bar{1}}^{00,00} = \tilde{g}_{1'\bar{1}}^{0,0} + \tilde{g}_{1'1'}^{0,0} \gamma_{00} G_{0'\bar{1}}^{10,00}, \quad (5.1.59)$$

$$G_{\bar{1}\bar{1}}^{00,00} = \tilde{g}_{\bar{1}\bar{1}}^{0,0} + \tilde{g}_{\bar{1}\bar{1}'}^{0,0} \gamma_{00} G_{0'\bar{1}}^{10,00}, \quad (5.1.60)$$

$$G_{\bar{1}\bar{1}}^{10,00} = \tilde{g}_{\bar{1}0'}^{1,0} \gamma_{00} G_{1'\bar{1}}^{00,00}, \quad (5.1.61)$$

$$G_{0'\bar{1}}^{10,00} = \tilde{g}_{0'0'}^{1,0} \gamma_{00} G_{1'\bar{1}}^{00,00}, \quad (5.1.62)$$

$$G_{\bar{1}\bar{1}}^{10,00} = \tilde{g}_{\bar{1}0'}^{1,0} \gamma_{00} G_{1'\bar{1}}^{00,00}. \quad (5.1.63)$$

Substituindo (5.1.62) em (5.1.59) obtém-se o termo dizimado $G_{1'\bar{1}}^{00,00}$.

$$G_{1'\bar{1}}^{00,00} = \tilde{g}_{1'\bar{1}}^{0,0} + \tilde{g}_{1'1'}^{0,0} \gamma_{00} \tilde{g}_{0'0'}^{1,0} \gamma_{00} G_{1'\bar{1}}^{00,00} \quad (5.1.64)$$

$$G_{1'1}^{00,00} = \tilde{g}_{1'1}^{0,0} \left[1 - \tilde{g}_{1'1}^{0,0} (\gamma_{00})^2 \tilde{g}_{0'0'}^{0,0} \right]^{-1} \quad (5.1.65)$$

Substituindo (5.1.65) em (5.1.61), (5.1.62) e (5.1.63) e em seguida nos termos (5.1.58), (5.1.59) e (5.1.60) obtemos os elementos não-nulos da primeira coluna de \mathbf{G} .

Para a segunda coluna de \mathbf{G} , temos:

$$G_{11'}^{00,00} = \tilde{g}_{11'}^{0,0} + \tilde{g}_{11'}^{0,0} \gamma_{00} G_{0'1'}^{10,00}, \quad (5.1.66)$$

$$G_{1'1'}^{00,00} = \tilde{g}_{1'1'}^{0,0} + \tilde{g}_{1'1'}^{0,0} \gamma_{00} G_{0'1'}^{10,00}, \quad (5.1.67)$$

$$G_{11'}^{00,00} = \tilde{g}_{11'}^{0,0} + \tilde{g}_{11'}^{0,0} \gamma_{00} G_{0'1'}^{10,00}, \quad (5.1.68)$$

$$G_{11'}^{10,00} = \tilde{g}_{10'}^{1,0} \gamma_{00} G_{1'1'}^{00,00}, \quad (5.1.69)$$

$$G_{0'1'}^{10,00} = \tilde{g}_{0'0'}^{1,0} \gamma_{00} G_{1'1'}^{00,00}, \quad (5.1.70)$$

$$G_{11'}^{10,00} = \tilde{g}_{10'}^{1,0} \gamma_{00} G_{1'1'}^{00,00}. \quad (5.1.71)$$

Substituindo (5.1.70) em (5.1.67) e reagrupando os termos chegamos a:

$$G_{1'1'}^{00,00} = \tilde{g}_{1'1'}^{0,0} \left[1 - \tilde{g}_{1'1'}^{0,0} \gamma_{00} \tilde{g}_{0'0'}^{1,0} \gamma_{00} \right]^{-1} \quad (5.1.72)$$

Para determinar os outros termos da 2ª coluna substituímos $G_{1'1'}^{00,00}$, dado por (5.1.72), em (5.1.69) e (5.1.71). Em seguida usamos $G_{0'1'}^{10,00}$ nas expressões (5.1.66), (5.1.67) e (5.1.68).

Para a terceira coluna de \mathbf{G} temos os seguintes termos não-nulos:

$$G_{11}^{00,00} = \tilde{g}_{11}^{0,0} + \tilde{g}_{11}^{0,0} \gamma_{00} G_{0'1}^{10,00}, \quad (5.1.73)$$

$$G_{1'1}^{00,00} = \tilde{g}_{1'1}^{0,0} + \tilde{g}_{1'1}^{0,0} \gamma_{00} G_{0'1}^{10,00}, \quad (5.1.74)$$

$$G_{11}^{00,00} = \tilde{g}_{11}^{0,0} + \tilde{g}_{11}^{0,0} \gamma_{00} G_{0'1}^{10,00}, \quad (5.1.75)$$

$$G_{11}^{10,00} = \tilde{g}_{10'}^{1,0} \gamma_{00} G_{1'1}^{00,00}, \quad (5.1.76)$$

$$G_{0'1}^{10,00} = \tilde{g}_{0'0'}^{1,0} \gamma_{00} G_{1'1}^{00,00}, \quad (5.1.77)$$

$$G_{11}^{10,00} = \tilde{g}_{10'}^{1,0} \gamma_{00} G_{1'1}^{00,00}. \quad (5.1.78)$$

Substituindo (5.1.77) em (5.1.74) fica,

$$G_{1'1}^{00,00} = \tilde{g}_{1'1}^{0,0} \left[1 - \tilde{g}_{1'1'}^{0,0} \gamma_{00} \tilde{g}_{0'0'}^{1,0} \gamma_{00} \right]^{-1}. \quad (5.1.79)$$

A expressão (5.1.79) aplicado em (5.1.76), (5.1.77) e (5.1.78) e em seguida $G_{0'1}^{10,00}$, obtido de (5.1.77), substituído em (5.1.73) e (5.1.75) nos fornece os termos da terceira coluna. Utilizando o mesmo processo teremos os elementos não-nulos da quarta coluna de \mathbf{G} .

$$G_{\bar{1}\bar{1}}^{01,00} = G_{\bar{1}\bar{1}}^{10,00}, \quad (5.1.80)$$

$$G_{1'\bar{1}}^{01,00} = G_{\bar{1}1'}^{10,00}, \quad (5.1.81)$$

$$G_{\bar{1}\bar{1}}^{01,00} = G_{\bar{1}\bar{1}}^{10,00}, \quad (5.1.82)$$

$$G_{\bar{1}\bar{1}}^{11,00} = \tilde{g}_{\bar{1}0'}^{1,0} + \tilde{g}_{\bar{1}0'}^{1,0} \gamma_{00} G_{1'\bar{1}}^{01,00}, \quad (5.1.83)$$

$$G_{0'\bar{1}}^{11,00} = \tilde{g}_{1'1}^{1,0} + \tilde{g}_{1'0'}^{1,0} \gamma_{00} G_{\bar{1}1'}^{01,00}, \quad (5.1.84)$$

$$G_{\bar{1}\bar{1}}^{11,00} = \tilde{g}_{\bar{1}\bar{1}}^{1,0} + \tilde{g}_{\bar{1}0'}^{1,0} \gamma_{00} G_{1'\bar{1}}^{01,00}. \quad (5.1.85)$$

As componentes não-nulas da quinta coluna de \mathbf{G} são dadas por:

$$G_{\bar{1}0'}^{01,00} = G_{0'\bar{1}}^{10,00}, \quad (5.1.86)$$

$$G_{1'0'}^{01,00} = G_{0'1'}^{10,00}, \quad (5.1.87)$$

$$G_{10'}^{01,00} = G_{10'}^{01,00}, \quad (5.1.88)$$

$$G_{\bar{1}0'}^{11,00} = \tilde{g}_{\bar{1}0'}^{11,00} + \tilde{g}_{\bar{1}0'}^{1,0} \gamma_{00} G_{1'0'}^{01,00}, \quad (5.1.89)$$

$$G_{0'0'}^{11,00} = \tilde{g}_{0'0'}^{1,0} + \tilde{g}_{0'0'}^{1,0} \gamma_{00} G_{1'0'}^{01,00}, \quad (5.1.90)$$

$$G_{10'}^{11,00} = \tilde{g}_{10'}^{1,0} + \tilde{g}_{10'}^{1,0} \gamma_{00} G_{1'0'}^{01,00}, \quad (5.1.91)$$

Para as componentes não-nulas da 6ª coluna de \mathbf{G} , temos:

$$G_{\bar{1}\bar{1}}^{01,00} = G_{\bar{1}\bar{1}}^{10,00}, \quad (5.1.92)$$

$$G_{1'\bar{1}}^{01,00} = G_{\bar{1}1'}^{10,00}, \quad (5.1.93)$$

$$G_{11}^{01,00} = G_{11}^{10,00}, \quad (5.1.94)$$

$$G_{11}^{11,00} = \tilde{g}_{11}^{1,0} + \tilde{g}_{10'}^{1,0} \gamma_{00} G_{1'1}^{01,00}, \quad (5.1.95)$$

$$G_{0'1}^{11,00} = \tilde{g}_{0'1}^{1,0} + \tilde{g}_{0'o'}^{1,0} \gamma_{00} G_{1'1}^{01,00}, \quad (5.1.96)$$

$$G_{11}^{11,00} = \tilde{g}_{11}^{1,0} + \tilde{g}_{10'}^{1,0} \gamma_{00} G_{1'1}^{01,00}. \quad (5.1.97)$$

Vamos utilizar as relações (5.1.55), (5.1.56) e (5.1.57) para obter as colunas em que $l, l' = 1, 1$. Para isso, basta trocar os índices inferiores dos elementos obtidos com $(l, l' = 0, 0)$ de $0'$ para $0''$, $1'$ para $1''$ e γ_{00} para γ_{11} . Desta maneira teremos todos os elementos dos blocos $\mathbf{G}^{00,11}$, $\mathbf{G}^{10,11}$, $\mathbf{G}^{01,11}$, $\mathbf{G}^{11,11}$.

Daqui por diante, podemos obter as funções de Green $\tilde{\mathbf{G}}$ para os interníveis de Landau conectados via interação γ_{01} e γ_{10} , vide figura (5.11). Utilizando a relação de Dyson, temos:

$$\tilde{\mathbf{G}} = \mathbf{G} + \mathbf{G}\mathbf{V}_\gamma\tilde{\mathbf{G}} \quad (5.1.98)$$

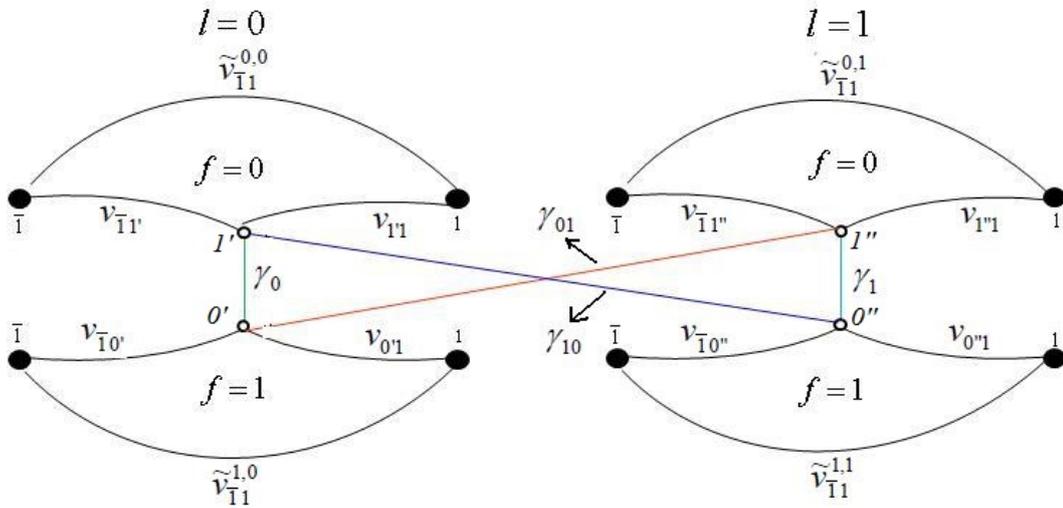


Figura 5.11 – Diagrama que representa a HDB, considerando a interação elétron-fônon com a presença do campo magnético

em que \mathbf{V}_γ é a matriz de hopping 12×12 que conecta os diferentes níveis de Landau.

$$\mathbf{V}_\gamma = \begin{pmatrix} \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{V}^{01,01} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{V}^{10,01} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{V}^{01,10} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{V}^{10,10} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \end{pmatrix}, \quad (5.1.99)$$

em que

$$\mathbf{V}^{10,01} = \mathbf{V}^{01,10} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & \gamma_{10} & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \mathbf{V}^{10,10} = \mathbf{V}^{01,01} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & \gamma_{01} & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (5.1.100)$$

A matriz $\tilde{\mathbf{G}}$, dada pelos elementos $\tilde{G}_{ij}^{ff',ll'}$, pode ser representada por uma matriz de blocos 3X3.

$$\tilde{\mathbf{G}} = \begin{pmatrix} \tilde{\mathbf{G}}^{00,00} & \tilde{\mathbf{G}}^{01,00} & \tilde{\mathbf{G}}^{00,01} & \tilde{\mathbf{G}}^{01,01} \\ \tilde{\mathbf{G}}^{10,00} & \tilde{\mathbf{G}}^{11,00} & \tilde{\mathbf{G}}^{10,01} & \tilde{\mathbf{G}}^{11,01} \\ \tilde{\mathbf{G}}^{00,10} & \tilde{\mathbf{G}}^{01,10} & \tilde{\mathbf{G}}^{00,11} & \tilde{\mathbf{G}}^{01,11} \\ \tilde{\mathbf{G}}^{10,10} & \tilde{\mathbf{G}}^{11,10} & \tilde{\mathbf{G}}^{10,11} & \tilde{\mathbf{G}}^{11,11} \end{pmatrix}. \quad (5.1.101)$$

Da relação (5.1.98) podemos chegar a

$$\begin{aligned} (\mathbf{1} - \mathbf{G}\mathbf{V}_\gamma) \tilde{\mathbf{G}} &= \mathbf{G}, \\ \tilde{\mathbf{G}} &= (\mathbf{1} - \mathbf{G}\mathbf{V}_\gamma)^{-1} \mathbf{G}. \end{aligned} \quad (5.1.102)$$

Definindo a matrizes,

$$\mathbf{M} = (\mathbf{1} - \mathbf{G}\mathbf{V}_\gamma)^{-1} \quad (5.1.103)$$

e

$$\bar{\mathbf{M}} = \mathbf{1} - \mathbf{G}\mathbf{V}_\gamma, \quad (5.1.104)$$

onde $\bar{\mathbf{M}} = \mathbf{M}^{-1}$, podemos escrever a expressão matricial (5.1.102) de forma simplificada

$$\tilde{\mathbf{G}} = \mathbf{M}\mathbf{G}, \quad (5.1.105)$$

em que \mathbf{M} também é representada por blocos 3x3.

$$\mathbf{M} = \begin{pmatrix} \mathbf{M}^{00,00} & \mathbf{M}^{01,00} & \mathbf{M}^{00,01} & \mathbf{M}^{01,01} \\ \mathbf{M}^{10,00} & \mathbf{M}^{11,00} & \mathbf{M}^{10,01} & \mathbf{M}^{11,01} \\ \mathbf{M}^{00,10} & \mathbf{M}^{01,10} & \mathbf{M}^{00,11} & \mathbf{M}^{01,11} \\ \mathbf{M}^{10,10} & \mathbf{M}^{11,10} & \mathbf{M}^{10,11} & \mathbf{M}^{11,11} \end{pmatrix}.$$

Para efeito de simplicidade, vamos determinar todos os elementos da matriz $\bar{\mathbf{M}}$, dada por (5.1.104), e apenas no final invertê-la para voltar à \mathbf{M} e resolver a equação (5.1.105).

$$\bar{\mathbf{M}}^{00,00} = \mathbf{1}^{00,00} - \mathbf{0} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (5.1.106)$$

$$\bar{\mathbf{M}}^{01,00} = \mathbf{1}^{01,00} - \mathbf{0} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (5.1.107)$$

$$\bar{\mathbf{M}}^{10,00} = \mathbf{1}^{10,00} - \mathbf{0} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (5.1.108)$$

$$\bar{\mathbf{M}}^{11,00} = \mathbf{1}^{11,00} - \mathbf{0} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (5.1.109)$$

$$\bar{\mathbf{M}}^{00,10} = \mathbf{1}^{00,10} - \mathbf{G}^{01,11} \mathbf{V}_\gamma^{10,10} = -\mathbf{G}^{01,11} \mathbf{V}_\gamma^{10,10}, \quad (5.1.110)$$

em que os termos não-nulos da matriz $\bar{\mathbf{M}}^{00,10}$ são,

$$\bar{M}_{11'}^{00,10} = -G_{10''}^{01,11} \gamma_{01},$$

$$\bar{M}_{1''1'}^{00,10} = -G_{1''0''}^{01,11} \gamma_{01},$$

$$\bar{M}_{11'}^{00,10} = -G_{10''}^{01,11} \gamma_{01},$$

então,

$$\bar{\mathbf{M}}^{00,10} = \begin{pmatrix} 0 & -G_{10''}^{01,11} \gamma_{01} & 0 \\ 0 & -G_{1''0''}^{01,11} \gamma_{01} & 0 \\ 0 & -G_{10''}^{01,11} \gamma_{01} & 0 \end{pmatrix}. \quad (5.1.111)$$

$$\bar{\mathbf{M}}^{01,10} = \mathbf{1}^{01,10} - \mathbf{G}^{00,11} \mathbf{V}_\gamma^{01,10} = -\mathbf{G}^{00,11} \mathbf{V}_\gamma^{01,10}, \quad (5.1.112)$$

ou seja,

$$\bar{\mathbf{M}}^{01,10} = \begin{pmatrix} 0 & -G_{11''}^{00,11} \gamma_{10} & 0 \\ 0 & -G_{1''1''}^{00,11} \gamma_{10} & 0 \\ 0 & -G_{11''}^{00,11} \gamma_{10} & 0 \end{pmatrix}. \quad (5.1.113)$$

$$\bar{\mathbf{M}}^{10,10} = \mathbf{1}^{10,10} - \mathbf{G}^{11,11} \mathbf{V}_\gamma^{10,10} = -\mathbf{G}^{11,11} \mathbf{V}_\gamma^{10,10}, \quad (5.1.114)$$

ou seja,

$$\bar{\mathbf{M}}^{10,10} = \begin{pmatrix} 0 & -G_{10''}^{11,11} \gamma_{01} & 0 \\ 0 & -G_{0''0''}^{11,11} \gamma_{01} & 0 \\ 0 & -G_{10''}^{11,11} \gamma_{01} & 0 \end{pmatrix}. \quad (5.1.115)$$

$$\bar{\mathbf{M}}^{11,10} = \mathbf{1}^{11,10} - \mathbf{G}^{10,11} \mathbf{V}_\gamma^{01,10} = -\mathbf{G}^{10,11} \mathbf{V}_\gamma^{01,10}, \quad (5.1.116)$$

ou seja,

$$\bar{\mathbf{M}}^{11,10} = \begin{pmatrix} 0 & -G_{11''}^{10,11} & \gamma_{10} & 0 \\ 0 & -G_{0'1''}^{10,11} & \gamma_{10} & 0 \\ 0 & -G_{11''}^{10,11} & \gamma_{10} & 0 \end{pmatrix}. \quad (5.1.117)$$

Com o mesmo procedimento chegamos aos demais blocos de $\bar{\mathbf{M}}$.

$$\bar{\mathbf{M}}^{00,01} = \begin{pmatrix} 0 & -G_{10'}^{01,00} & \gamma_{10} & 0 \\ 0 & -G_{1'0'}^{01,00} & \gamma_{10} & 0 \\ 0 & -G_{10'}^{01,00} & \gamma_{10} & 0 \end{pmatrix}, \quad (5.1.118)$$

$$\bar{\mathbf{M}}^{01,01} = \begin{pmatrix} 0 & -G_{11'}^{00,00} & \gamma_{01} & 0 \\ 0 & -G_{1'1'}^{00,00} & \gamma_{01} & 0 \\ 0 & -G_{11'}^{00,00} & \gamma_{01} & 0 \end{pmatrix}, \quad (5.1.119)$$

$$\bar{\mathbf{M}}^{10,01} = \begin{pmatrix} 0 & -G_{10'}^{11,00} & \gamma_{10} & 0 \\ 0 & -G_{0'0'}^{01,01} & \gamma_{10} & 0 \\ 0 & -G_{10'}^{01,01} & \gamma_{10} & 0 \end{pmatrix}, \quad (5.1.120)$$

$$\bar{\mathbf{M}}^{11,01} = \begin{pmatrix} 0 & -G_{11'}^{10,00} & \gamma_{01} & 0 \\ 0 & -G_{0'1'}^{10,00} & \gamma_{01} & 0 \\ 0 & -G_{11'}^{10,00} & \gamma_{01} & 0 \end{pmatrix}, \quad (5.1.121)$$

$$\bar{\mathbf{M}}^{00,11} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (5.1.122)$$

$$\bar{\mathbf{M}}^{01,11} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (5.1.123)$$

$$\bar{\mathbf{M}}^{10,11} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (5.1.124)$$

$$\bar{\mathbf{M}}^{11,11} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (5.1.125)$$

Após obtermos todos os blocos da matriz $\bar{\mathbf{M}}$ devemos invertê-la (vide apêndice A) para determinar todos os elementos da função de Green dos níveis de Landau conectados $\tilde{\mathbf{G}}$.

Utilizando a expressão (5.1.105), vamos expressar apenas as funções de Green importantes para o cálculo da corrente eletrônica. Como o elétron entra na HDB pelo canal $f = 0$ no sítio renormalizado $\bar{1}$ e pode sair por $f' = 0, 1$ e $l, l' = 0, 1$ no sítio renormalizado 1, teremos apenas a contribuição de $\tilde{G}_{\bar{1}\bar{1}}^{0f',ll'}$.

O bloco de $\tilde{\mathbf{G}}^{00,00}$, é obtido pela expressão (5.1.104).

$$\tilde{\mathbf{G}}^{00,00} = \mathbf{M}^{00,00} \mathbf{G}^{00,00} + \mathbf{M}^{01,00} \mathbf{G}^{10,00} \quad (5.1.126)$$

então teremos o elemento,

$$\begin{aligned} \tilde{G}_{\bar{1}\bar{1}}^{00,00} &= M_{\bar{1}\bar{1}}^{00,00} G_{11}^{00,00} + M_{\bar{1}1'}^{00,00} G_{1'1}^{00,00} + M_{\bar{1}\bar{1}}^{00,00} G_{\bar{1}\bar{1}}^{00,00} \\ &+ M_{\bar{1}\bar{1}}^{01,00} G_{11}^{10,00} + M_{\bar{1}0'}^{01,00} G_{0'1}^{10,00} + M_{\bar{1}\bar{1}}^{01,00} G_{\bar{1}\bar{1}}^{10,00}. \end{aligned} \quad (5.1.127)$$

Utilizando-se as definições do apêndice A podemos escrever (5.1.127) da forma:

$$\tilde{G}_{\bar{1}\bar{1}}^{00,00} = \alpha_{12} G_{1'1}^{00,00} + G_{\bar{1}\bar{1}}^{00,00} + \alpha_{15} G_{0'1}^{10,00}, \quad (5.1.128)$$

onde α_{12} e α_{15} são dadas por (A.0.18) e (A.0.19), respectivamente.

Para o bloco $\tilde{\mathbf{G}}^{01,00}$, novamente de (5.1.104), temos:

$$\tilde{\mathbf{G}}^{01,00} = \mathbf{M}^{00,00} \mathbf{G}^{01,00} + \mathbf{M}^{01,00} \mathbf{G}^{11,00}, \quad (5.1.129)$$

em termos do sub-índice temos

$$\tilde{G}_{\bar{1}\bar{1}}^{01,00} = \alpha_{12} G_{1'1}^{01,00} + G_{\bar{1}\bar{1}}^{01,00} + \alpha_{15} G_{0'1}^{11,00}. \quad (5.1.130)$$

Para $\tilde{\mathbf{G}}^{01,00}$, fica:

$$\tilde{\mathbf{G}}^{00,01} = \mathbf{M}^{00,01} \mathbf{G}^{00,11} + \mathbf{M}^{01,01} \mathbf{G}^{10,11}, \quad (5.1.131)$$

então temos:

$$\tilde{G}_{\bar{1}\bar{1}}^{00,01} = -(m_{12} \delta_{22} + m_{15} \delta_{52}) G_{1''1}^{00,11} - (m_{12} \delta_{25} + m_{15} \delta_{55}) G_{0''1}^{10,11}. \quad (5.1.132)$$

De forma similar o bloco $\tilde{\mathbf{G}}^{01,01}$ fica:

$$\tilde{\mathbf{G}}^{01,01} = \mathbf{M}^{00,01} \mathbf{G}^{01,11} + \mathbf{M}^{01,01} \mathbf{G}^{11,11}, \quad (5.1.133)$$

então,

$$\tilde{G}_{\bar{1}\bar{1}}^{01,01} = -(m_{12} \delta_{22} + m_{15} \delta_{52}) G_{1''1}^{01,11} - (m_{12} \delta_{25} + m_{15} \delta_{55}) G_{0''1}^{11,11}. \quad (5.1.134)$$

Da mesma maneira $\tilde{\mathbf{G}}^{00,10}$ fica:

$$\tilde{\mathbf{G}}^{00,10} = \mathbf{M}^{00,10} \mathbf{G}^{00,00} + \mathbf{M}^{01,10} \mathbf{G}^{10,00}, \quad (5.1.135)$$

então,

$$\tilde{G}_{11}^{00,10} = -(b_{12} + \delta_{12}b_{22} + \delta_{15}b_{52})G_{1'1}^{00,00} - (b_{15} + \delta_{15}b_{25} + \delta_{15}b_{55})G_{0'1}^{10,00}. \quad (5.1.136)$$

Explicitando $\tilde{\mathbf{G}}^{01,10}$, temos:

$$\tilde{\mathbf{G}}^{01,10} = \mathbf{M}^{00,10} \mathbf{G}^{01,00} + \mathbf{M}^{01,10} \mathbf{G}^{11,00}, \quad (5.1.137)$$

então,

$$\tilde{G}_{11}^{01,10} = -(b_{12} + \delta_{12}b_{22} + \delta_{15}b_{52})G_{1'1}^{01,00} - (b_{15} + \delta_{15}b_{25} + \delta_{15}b_{55})G_{0'1}^{11,00}. \quad (5.1.138)$$

Para $\tilde{\mathbf{G}}^{00,11}$, temos:

$$\tilde{\mathbf{G}}^{00,11} = \mathbf{M}^{00,11} \mathbf{G}^{00,11} + \mathbf{M}^{01,11} \mathbf{G}^{10,11}, \quad (5.1.139)$$

então,

$$\tilde{G}_{11}^{00,11} = G_{11}^{00,11} + \delta_{12}G_{1''1}^{00,11} + \delta_{15}G_{0''1}^{10,11}. \quad (5.1.140)$$

Finalmente, para o bloco $\tilde{\mathbf{G}}^{01,11}$, temos:

$$\tilde{\mathbf{G}}^{01,11} = \mathbf{M}^{00,11} \mathbf{G}^{01,11} + \mathbf{M}^{01,11} \mathbf{G}^{11,11}, \quad (5.1.141)$$

então,

$$\tilde{G}_{11}^{01,11} = G_{11}^{01,11} + \delta_{12}G_{1''1}^{01,11} + \delta_{15}G_{0''1}^{11,11}. \quad (5.1.142)$$

5.2 Cálculo da corrente unidimensional

Iremos reportar os cálculos da corrente total na HDB feitas no capítulo 4, porém agora considerando a interação elétron-fônon e a conexão entre os níveis de Landau. Na última seção vimos que vários canais são abertos com a interação elétron-fônon e a conexão entre níveis de Landau. Estes canais são sem emissão de fônons ($f = 0$) e com emissão de fônons ($f = 1$) de energia $\hbar\omega_0$ cujos elétrons têm energia ciclotron $E_l = l\hbar\omega_c$, com $l = 0, 1$.

A corrente média para um canal f e um canal l fica similar àquela obtida na expressão (4.2.5):

$$\bar{I}^{f,l} = \frac{ev}{h} \int_{-\infty}^{\infty} dE \left[\tilde{G}_{j-1,j}^{ff,ll<}(E) - \tilde{G}_{j,j-1}^{ff,ll<}(E) \right], \quad (5.2.1)$$

com a energia total do definida por:

$$E = E' + f(\hbar\omega_0) + l(\hbar\omega_c). \quad (5.2.2)$$

A corrente total média na direção z é dada por:

$$\bar{I} = \sum_{f,l=0}^1 \bar{I}^{f,l}, \text{ para } f, l = 0, 1 \quad (5.2.3)$$

Ao considerar a corrente de elétrons que passa por um dos canais f, l da HDB, representaremos as semicadeias à direita e à esquerda pelos planos renormalizados $\bar{2}$ e $\bar{1}$ conectados com o poço, representados pelos planos $\bar{1}$ e 1 com mostra a figura (4.8).

A corrente de elétrons que passa no canal f, l entre os planos $\bar{2}$ e $\bar{1}$ será:

$$\bar{I}^{f,l} = \frac{ev}{h} \int_{-\infty}^{\infty} dE' \left[\tilde{G}_{\bar{2}\bar{1}}^{ff,ll<}(E') - \tilde{G}_{\bar{1}\bar{2}}^{ff,ll<}(E') \right]. \quad (5.2.4)$$

Podemos escrever as funções de Green não perturbadas dos planos $\bar{1}$ e $\bar{2}$ na seguinte representação:

$$\tilde{\mathbf{g}}^{<} = \begin{bmatrix} \tilde{\mathbf{g}}^{0,0<} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \tilde{\mathbf{g}}^{1,0<} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \tilde{\mathbf{g}}^{0,1<} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \tilde{\mathbf{g}}^{1,1<} \end{bmatrix}, \quad (5.2.5)$$

onde

$$\tilde{\mathbf{g}}^{f,l<} = \begin{bmatrix} \tilde{g}_2^{f,l<} & 0 \\ 0 & \tilde{g}_1^{f,l<} \end{bmatrix}, \text{ para } f, l = 0, 1. \quad (5.2.6)$$

O “hopping” dos elétrons pode ser representado por:

$$\Sigma^a = \Sigma^r = \begin{bmatrix} \mathbf{0} & \tilde{\mathbf{V}} \\ \tilde{\mathbf{V}} & \mathbf{0} \end{bmatrix} \quad (5.2.7)$$

onde

$$\tilde{\mathbf{V}} = \begin{bmatrix} 0 & v \\ v & 0 \end{bmatrix}, \quad (5.2.8)$$

de modo que podemos supor que $\Sigma^{<} = 0$, para tunelamentos não interagentes e que $g_1^{f,l>} = g_1^{f,l>} = 0$, já que para o sistema considerado não há buracos no emissor e no coletor antes da reconexão. Usando as relações (4.2.13) e (4.2.14) obtemos a seguinte expressão:

$$\tilde{G}_{\bar{2}\bar{1}}^{ff,ll<} - \tilde{G}_{\bar{1}\bar{2}}^{ff,ll<} = v \left[\tilde{G}_{\bar{1}\bar{1}}^{ff,ll<} \tilde{g}_2^{f,l>} - \tilde{g}_2^{f,l<} \tilde{G}_{\bar{1}\bar{1}}^{ff,ll>} \right]. \quad (5.2.9)$$

Utilizando-se da relação de Keldysh (3.2.50) na conexão das semicadeias ao poço temos:

$$\tilde{G}_{\bar{1}\bar{1}}^{ff, ll>} = \sum_{f', l'=0}^1 v^2 \left[|\tilde{G}_{\bar{1}\bar{1}}^{ff', ll''}|^2 \tilde{g}_2^{f', l'>} + |\tilde{G}_{\bar{1}\bar{1}}^{ff', ll''}|^2 \tilde{g}_2^{f', l'>} \right]. \quad (5.2.10)$$

Da mesma maneira encontramos a relação,

$$\tilde{G}_{\bar{1}\bar{1}}^{ff, ll<} = \sum_{f', l'=0}^1 v^2 \left[|\tilde{G}_{\bar{1}\bar{1}}^{ff', ll''}|^2 \tilde{g}_2^{f', l'<} + |\tilde{G}_{\bar{1}\bar{1}}^{ff', ll''}|^2 \tilde{g}_2^{f', l'<} \right]. \quad (5.2.11)$$

Substituindo as relações (5.2.10) e (5.2.11) na expressão (5.2.9) chegamos na forma simplificada expressa por:

$$\tilde{G}_{\bar{2}\bar{1}}^{ff, ll<} - \tilde{G}_{\bar{1}\bar{2}}^{ff, ll<} = v^3 \sum_{f', l'=0}^1 |\tilde{G}_{\bar{1}\bar{1}}^{ff', ll''}|^2 \left[\tilde{g}_2^{f', l'<} \tilde{g}_2^{f', l'>} - \tilde{g}_2^{f', l'>} \tilde{g}_2^{f', l'<} \right]. \quad (5.2.12)$$

levando em conta que:

$$\tilde{g}_j^{f, l<}(E') = in_j(E') \rho_j^{f, l}(E') \quad j = \bar{2}, \quad (5.2.13)$$

$$\tilde{g}_j^{f, l>}(E') = i[1 - n_j(E')] \rho_j^{f, l}(E') \quad j = 2. \quad (5.2.14)$$

sendo $n_1^{f, l}(E') = n_d(E - f(\hbar\omega_0) - l(\hbar\omega_c))$, $n_{\bar{1}}^{f, l}(E') = n_e(E - f(\hbar\omega_0) - l(\hbar\omega_c))$, $\rho_1^{f, l}(E') = \rho_d^{f, l}(E - f(\hbar\omega_0) - l(\hbar\omega_c))$ e $\rho_{\bar{1}}^{f, l}(E') = \rho_e^{f, l}(E - f(\hbar\omega_0) - l(\hbar\omega_c))$.

A contribuição eletrônica é nula para $f \neq 0$, $l \neq 0, 1$ e $f', l' \neq 0, 1$, pois $\rho_e^{f \neq 0, l \neq 0, 1} = 0$ e $\rho_d^{f', l' \neq 0, 1} = 0$.

A corrente unidimensional (4.2.3) poderá ser escrita da seguinte forma:

$$\bar{I} = \frac{ev^4}{h} \int_{-\infty}^{\infty} dE' \sum_{f', l, l'=0}^1 |G_{\bar{1}\bar{1}}^{0f', ll''}(E')|^2 [n_e - n_d] \rho_e^{0, l}(E') \rho_d^{f', l'}(E'). \quad (5.2.15)$$

Os termos entre colchetes representam a distribuição de Fermi-Dirac à esquerda (n_e) e à direita (n_d) definidas pelas relações (4.4.9) e (4.4.10).

A corrente de elétrons (5.2.15) depende explicitamente dos canais intra-níveis de Landau $\tilde{G}_{\bar{1}\bar{1}}^{00, 00}$, $\tilde{G}_{\bar{1}\bar{1}}^{00, 11}$, $\tilde{G}_{\bar{1}\bar{1}}^{01, 00}$ e $\tilde{G}_{\bar{1}\bar{1}}^{01, 11}$. Da mesma forma teremos a contribuição dos canais interníveis de Landau $\tilde{G}_{\bar{1}\bar{1}}^{01, 01}$, $\tilde{G}_{\bar{1}\bar{1}}^{01, 10}$, $\tilde{G}_{\bar{1}\bar{1}}^{00, 01}$ e $\tilde{G}_{\bar{1}\bar{1}}^{00, 10}$. Todos estes canais foram obtidos na seção anterior pelas expressões (5.1.128), (5.1.130), (5.1.132), (5.1.134), (5.1.136), (5.1.138), (5.1.140), (5.1.142).

5.3 Equações cinéticas estacionárias

Neste tópico vamos explicitar a dinâmica que governa as populações de elétrons e fônons dentro do poço. Isto leva a um conjunto de equações cinéticas que nos permite estudar as taxas de emissão e absorção de fônons.

Ao discutir o problema unidimensional, a taxa de crescimento das populações de elétrons e fônons depende dos níveis de Landau l . A taxa com que o número de elétrons injetados no primeiro estado excitado varia com o tempo pode ser escrita como:

$$\frac{dn_1}{dt} = Q - \sum_l [w_+ n_1 - w_- n_0] - R_1 n_1, \quad (5.3.1)$$

em que o termo Q representa a taxa de elétrons que entram na barreira esquerda e os termos n_0 , n_1 são as populações de elétrons no estado fundamental e excitado. R_1 é a taxa de escape dos elétrons no estado excitado pela barreira direita e w_+ , w_- são as taxas de emissão e absorção dos fônons LO_1 .

Para os elétrons situados no estado fundamental podemos escrever:

$$\frac{dn_0}{dt} = \sum_l [w_+ n_1 - w_- n_0] - R_0 n_0. \quad (5.3.2)$$

Para estabelecer a equação cinética dos fônons LO_1 , supõe-se que a taxa de escape dos fônons seja desprezível em relação a sua taxa de decaimento

$$\frac{dn_{LO}}{dt} = \sum_l [w_+ n_1 - w_- n_0] - \alpha_0 n_{LO}, \quad (5.3.3)$$

em que a taxa de decaimento é definida pelo termo $\alpha_0 = \gamma_0(1 + n_{TA})$ e n_{LO} representa o número de fônons primários. O termo $(1 + n_{TA})$ é o fator de Bose, que dá lugar à emissão estimulada.

A expressão que estabelece a dinâmica do fônons TA é escrita como

$$\frac{dn_{TA}}{dt} = \alpha_0 n_{LO} - \frac{n_{TA}}{\tau}, \quad (5.3.4)$$

em que n_{TA} representa o número de fônons secundários e $1/\tau$ é a taxa de escape do fônons TA do poço.

Através dos trabalhos [Makler et al. 1998, Barci 1996], pode-se mostrar que as equações diferenciais (5.3.1), (5.3.2), (5.3.3) e (5.3.4) tornam-se um sistema de equações simplificadas.

$$\frac{dn_1}{dt} = Q - w[n_1(n_{LO} + 1) - n_0 n_{LO}] - R_1 n_1, \quad (5.3.5)$$

$$\frac{dn_0}{dt} = w[n_1(n_{LO} + 1) - n_0 n_{LO}] - R_0 n_0, \quad (5.3.6)$$

$$\frac{dn_{LO}}{dt} = w[n_1(n_{LO} + 1) - n_0n_{LO}] - \gamma_0(1 + n_{TA})n_{LO}, \quad (5.3.7)$$

$$\frac{dn_{TA}}{dt} = \gamma_0(1 + n_{TA})n_{LO} - \frac{n_{TA}}{\tau}. \quad (5.3.8)$$

O balanço líquido entre as taxas de emissão e absorção de fônons LO é representado pela termo $w[n_1(n_{LO} + 1) - n_0n_{LO}]$ em que w foi calculado anteriormente por [Licari e Evrad 1977]. O termo $(1 + n_{LO})$ descreve a emissão estimulada e o fator $\gamma_0(1 + n_{TA})n_{LO}$ descreve a taxa de decaimento de fônons LO .

Podemos estudar a solução estacionária das equações acima fazendo suas derivadas temporais iguais a zero.

$$Q = R_0n_0 + R_1n_1 \quad (5.3.9)$$

$$R_0n_0 = w[n_1(n_{LO} + 1) - n_0n_{LO}], \quad (5.3.10)$$

$$R_0n_0 = \gamma_0(1 + n_{TA})n_{LO}, \quad (5.3.11)$$

$$\frac{n_{TA}}{\tau} = \gamma_0(1 + n_{TA})n_{LO}. \quad (5.3.12)$$

Das expressões acima, os parâmetros Q , R_0 , R_1 , γ_0 , w e τ são tomados como independentes das populações. Desta forma vamos exprimir as relações entre as populações em termos da população dos fônons transversais acústicos n_{TA} . Da equação (5.3.12) podemos escrever:

$$n_{LO} = \frac{n_{TA}}{\gamma_0(1 + n_{TA})\tau}. \quad (5.3.13)$$

Ao igualar as equações (5.3.11) e (5.3.12) encontra-se

$$n_0 = \frac{n_{TA}}{\tau R_0}. \quad (5.3.14)$$

Substituindo (5.3.14) em (5.3.9) fica

$$n_1 = \frac{Q - n_{TA}/\tau}{R_1}. \quad (5.3.15)$$

Substituindo as equações (5.3.13), (5.3.14) e (5.3.15) na expressão (5.3.10) que representa o balanço entre a taxa de emissão e absorção dos fônons LO , chegamos à seguinte equação para os fônons n_{TA} :

$$\left[1 + \tau\gamma_0 + \frac{\gamma_0\tau R_1}{w} + \frac{R_1}{R_0}\right]n_{TA}^2 + \left[\tau + \frac{\gamma_0\tau R_1}{w} - Q\tau(\gamma_0\tau + 1)\right]n_{TA} - Q\tau^2\gamma_0 = 0. \quad (5.3.16)$$

A solução da equação acima apresenta uma raiz positiva e outra espúria, já que o termo independente corresponde ao produto de raízes que é menor ou igual a zero, assim uma das soluções

é negativa. Para o cálculo da taxa de escape dos elétrons, através da barreira à direita, foi feito uma aproximação clássica, dada por:

$$R_{m'} = \frac{1}{2d} v(k_{m'}) T_{m'}, \quad \text{para } m' = 0', 1'. \quad (5.3.17)$$

ou seja, $R_{m'}$ é igual ao produto da frequência das tentativas de tunelar (ligado classicamente ao conceito de tempo de voo) vezes a probabilidade de tunelar (dada pela transmitância da barreira direita). Assim, para barreira direita, obtém-se:

$$R_{m'} = \frac{1}{2d} v(k) T_{m'} = \frac{1}{2d} \left(\frac{2E_{m'}}{m^*} \right)^{1/2} T_{m'}. \quad (5.3.18)$$

A transmitância em uma barreira simples é dada por:

$$T_{m'}^{-1} = 1 + \frac{V^2}{4E(V - E_{m'})} \sinh^2 \left(\frac{2l_b}{\hbar} \sqrt{2m(V - E_{m'})} \right), \quad (5.3.19)$$

sendo V a altura da barreira (nos cálculos foram feitas médias entre o maior e o menor ponto do topo da barreira), $l_b = N_b a$ a largura da barreira e N_b o número de camadas da barreira à direita.

5.4 Efeito da acumulação de carga

Nesta secção será incluída a interação elétron-elétron nos cálculos de transporte. A inclusão de tal fenômeno é feita através de um cálculo auto-consistente entre a distribuição de cargas e o perfil do potencial na região de espalhamento. A partir de uma distribuição de cargas é possível calcular o perfil de potencial e, conseqüentemente, uma nova distribuição de cargas. Este processo termina quando há uma convergência na distribuição de carga.

Considerando-se os dois níveis de menores energias do poço ocupado, obtém-se a seguinte densidade superficial de carga para cada sítio j dentro da HDB,

$$\sigma(z_j) = \sigma_j = -\frac{e}{S} (n_{0'} |u_{0'j}|^2 + n_{1'} |u_{1'j}|^2), \quad (5.4.1)$$

sendo $z_j = ja$, e o módulo da carga do elétron, S a área da superfície do dispositivo, $u_{0'j}$ e $u_{1'j}$ as coordenadas dos auto-vetores $m = 0'$ e $m = 1'$ em relação ao sítio j do poço, $n_{1'}$ e $n_{0'}$ o número de ocupação elétrons no primeiro estado excitado e fundamental, calculados na secção anterior. A carga total na região de espalhamento é dada por:

$$q = \sum_{j=0}^{N-1} q_j = \sum_{j=0}^{N-1} \sigma(z_j) S = -e(n_{0'} + n_{1'}), \quad (5.4.2)$$

sendo $q_j = q(z_j)$ a carga superficial no sítio j .

Com a densidade de carga superficial, pode-se calcular a energia potencial dentro do poço, resolvendo-se uma equação de Poisson unidimensional na direção z .

$$\nabla^2 \phi(z) = \frac{d^2 \phi(z)}{dz^2} = -\frac{\rho(z)}{\epsilon}, \quad (5.4.3)$$

em que $\rho(z)$ é a densidade volumétrica de cargas e ε é a permissividade elétrica do meio. Neste trabalho foi considerado somente a permissividade do GaAs. O potencial e a distribuição de cargas são funções discretizadas, portanto $\phi(z) = \phi(z_j)$ e $\rho(z) = \rho(z_j)$, sendo $z_j = ja$. Além disto, no nosso modelo, $\rho(z_j)$ é definido como

$$\rho(z_j) = \frac{\sigma(z_j)}{a}, \quad (5.4.4)$$

onde a é a distância entre os planos perpendiculares à z . Utilizando-se da aproximação da derivada segunda em diferenças finitas, dada por:

$$\frac{d^2\phi(z_j)}{dz^2} \approx \frac{\phi_{j-1} - 2\phi_j + \phi_{j+1}}{a^2}, \quad (5.4.5)$$

A seguinte relação para equação de Poisson é obtida.

$$\phi_{j-1} - 2\phi_j + \phi_{j+1} = -\frac{a\sigma_j}{\varepsilon}, \quad (5.4.6)$$

em que $\phi(z_j) = \phi_j$ e σ_j é dado pela eq.(5.4.1). Sabendo-se que o potencial ϕ_j satisfaz a condição de contorno homogênea:

$$\phi_{\bar{1}} = \phi_N = 0.$$

A eq.(5.4.6) pode ser escrita em termos de matrizes:

$$\mathbf{M}\phi = -\tilde{\sigma}, \quad (5.4.7)$$

ou

$$\begin{bmatrix} \ddots & \ddots & \ddots & & \\ \ddots & -2 & 1 & 0 & \\ \ddots & 1 & -2 & 1 & \\ & 0 & 1 & -2 & \ddots \\ & & \ddots & \ddots & \ddots \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \phi_0 \\ \vdots \\ \phi_j \\ \vdots \\ \phi_{N-1} \end{bmatrix} = - \begin{bmatrix} \frac{a\sigma_1}{\varepsilon} \\ \vdots \\ \frac{a\sigma_j}{\varepsilon} \\ \vdots \\ \frac{a\sigma_{N-1}}{\varepsilon} \end{bmatrix}. \quad (5.4.8)$$

Multiplicando-se a eq.(5.4.7) pela matriz inversa de \mathbf{M} , obtém-se,

$$\mathbf{M}^{-1}\mathbf{M}\phi = -\mathbf{M}^{-1}\tilde{\sigma}, \quad (5.4.9)$$

ou

$$\phi = \mathbf{G}^e \tilde{\sigma}, \quad (5.4.10)$$

na qual

$$\mathbf{G}^e = -\mathbf{M}^{-1}. \quad (5.4.11)$$

\mathbf{G}^e é a função de Green eletromagnética discreta unidimensional cujas componentes são dadas por:

$$G_{ij}^e = \begin{cases} \frac{1}{N+1}i(N+1-j) & \text{if } i \leq j; \\ \frac{1}{N+1}j(N+1-i) & \text{if } i > j. \end{cases} \quad (5.4.12)$$

em que N é o número de planos dentro da HDB. Essas relações satisfazem as seguintes relações:

$$G_{1j}^e = G_{Nj}^e = 0, \quad (5.4.13)$$

$$G_{ij-1}^e - 2G_{ij}^e + G_{ij+1}^e = \delta_{ij}. \quad (5.4.14)$$

Portanto, da eq. (5.4.10), encontra-se o potencial criado pelos elétrons dentro do poço:

$$\phi_j = \frac{a}{\varepsilon(N+1)} \left[\sum_{j<i} j(N+1-i)\sigma_j + \sum_{j\geq i} i(N+1-j)\sigma_j \right]. \quad (5.4.15)$$

Assim, no formalismo segunda quantização, o hamiltoniano devido a interação elétron-elétron dentro do poço é dado por:

$$\hat{H}_{e-e} = -e \sum_{j=0}^{N+1} \phi_j c_j^\dagger c_j. \quad (5.4.16)$$

Introduzindo-se essa interação no hamiltoniano eletrônico,

$$\hat{H}_e = \hat{H}_e + \hat{H}_{e-e}^n. \quad (5.4.17)$$

em que $\hat{H}_{e-e}^n = \hat{H}_{e-e}$ e n é o número de iteração. Consequentemente, novos auto-estados no poço são gerados, os quais, por sua vez, geram uma nova corrente, novas taxas de escapes (R_0, R_1'), uma nova densidade de carga e um novo potencial de interação o qual novamente é introduzido na parte eletrônica do hamiltoniano. Este ciclo termina quando a carga total da região de espalhamento converge, vide fig.(5.12).

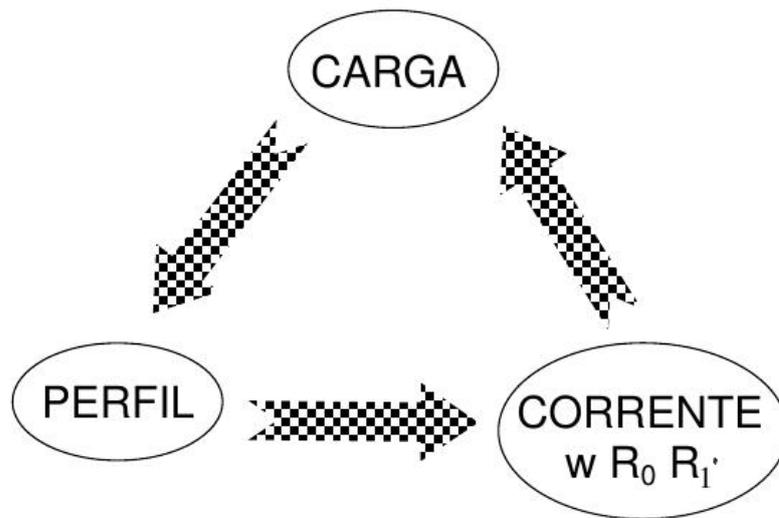


Figura 5.12 – Diagrama de fluxo que representa o cálculo auto-consistente

CAPÍTULO 6

Resultados

Neste capítulo serão analisados os resultados numéricos, usando fortran 90, da transmitância (eq. (4.3.44)), das correntes eletrônicas (eq. (5.2.15)) e intensidades do fônon TA (eq. (5.3.16)) provenientes dos canais com e sem emissão de fônons para diferentes níveis de Landau. Usamos as dimensões da HDB tal que a condição de ressonância seja atingida, ou seja, $\Delta E \approx \hbar\omega_0$.

Consideramos, inicialmente, a HDB com largura do poço de $d = 197,75\text{\AA}$ (70 camadas), feitas de GaAs, e as larguras das barreiras de $b_e = b_d = 56,5\text{\AA}$ (20 camadas), feitas de AlGaAs com uma concentração de alumínio de 0,38 que corresponde a uma barreira de potencial de $V = 300\text{meV}$. Daí, chegamos à transmitância na HDB com as respectivas contribuições com e sem emissão de fônons para diferentes níveis de Landau na condição de ressonância. Nos resultados computacionais, considerou-se valor efetivo para interação elétron-fônon $\gamma = 0,45\text{meV}$ [Camps et al. 2001] e a energia de Fermi no emissor GaAs foi adotada em 15meV [Makler et al. 1998]. No gráfico (6.1) é mostrada a transmitância através da HDB em função da energia para um potencial externo fixo de $U = 72\text{mV}$ a uma temperatura de $T = 15\text{K}$. Foi aplicado um campo magnético de $B \approx 0,59\text{T}$ que corresponde a uma energia ciclotron de $\hbar\omega_c = 1\text{meV}$. Verifica-se no gráfico que para as energias $\varepsilon = 8,5\text{meV}$ (pico 1) e $\varepsilon = 9,5\text{meV}$ (pico 2) temos os picos ressonantes correspondentes ao estado excitado E_1 para os níveis de Landau $l = 0$ e $l = 1$, respectivamente. Observa-se que a separação entre estes picos é exatamente a energia ciclotron de 1meV . Para energia $\varepsilon = 9,61\text{meV}$ (pico 3) e $\varepsilon = 10,61\text{meV}$ (pico 4) são mostradas as contribuições dos picos satélites do estado fundamental, que correspondem à emissão de um fônon LO para diferentes níveis de Landau. Considerando as energias ciclotron de 1.5meV e 2meV para $U = 72\text{mV}$ chegamos, respectivamente, aos gráficos (6.2) e (6.3).

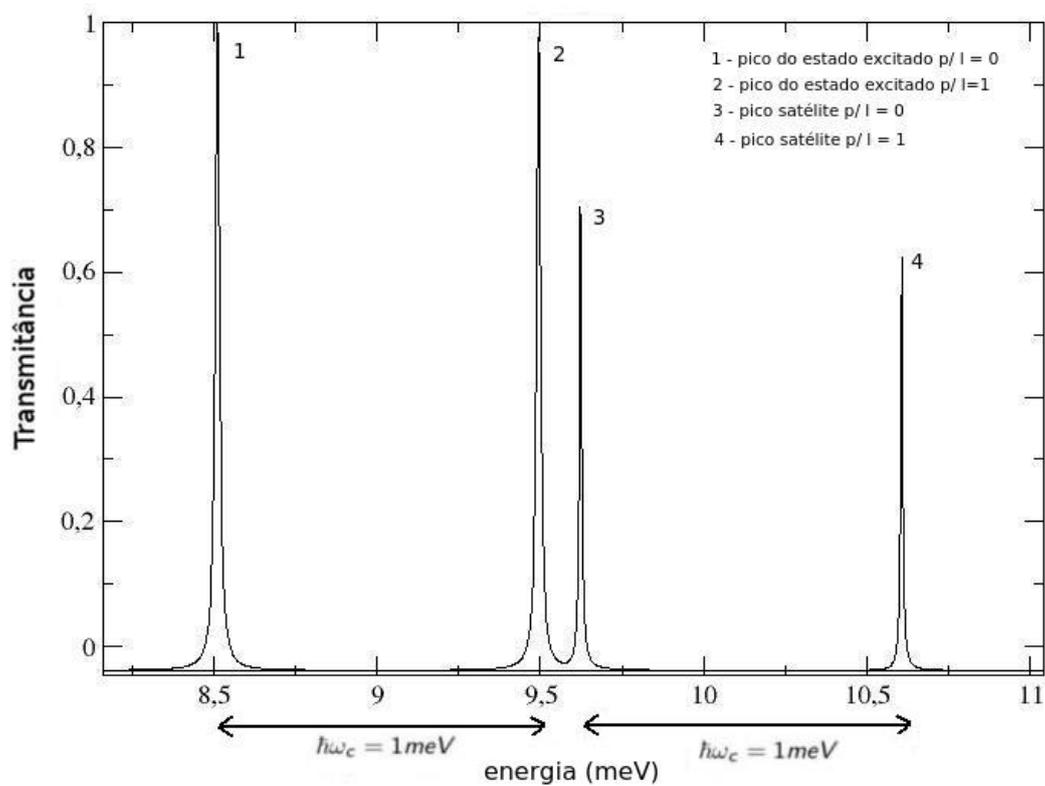


Figura 6.1 – Resultados que mostram a transmitância para diferentes níveis de Landau $p/\hbar\omega_c = 1\text{meV}$

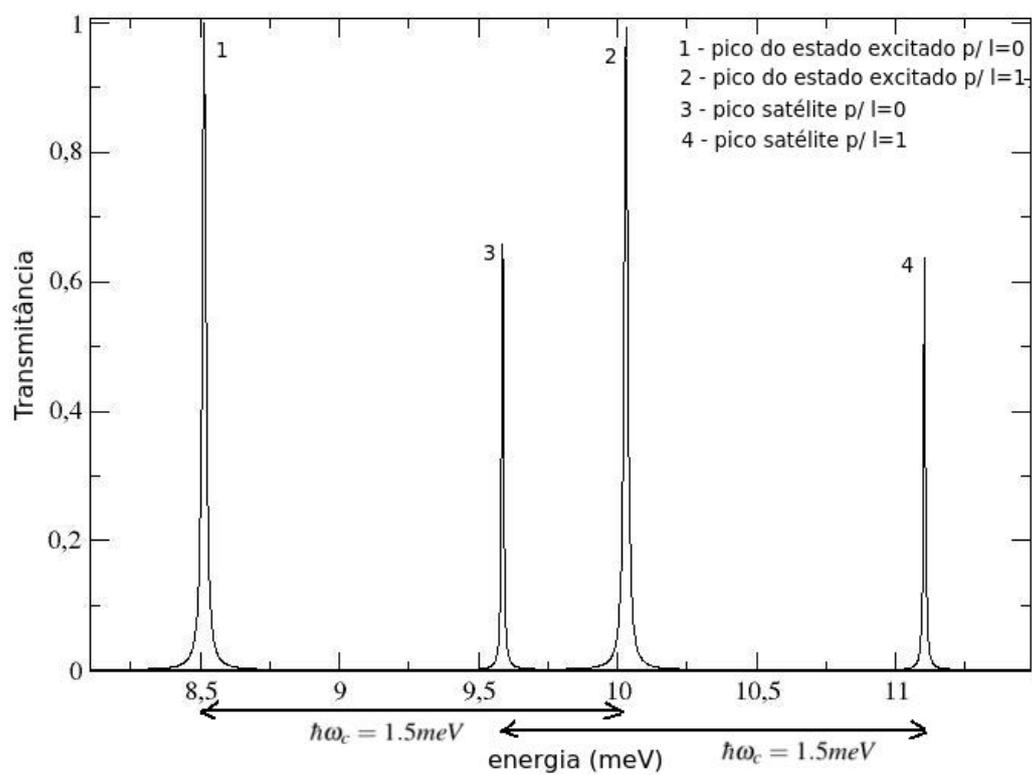


Figura 6.2 – Resultados que mostram a transmitância para diferentes níveis de Landau $p/\hbar\omega_c = 1.5\text{meV}$

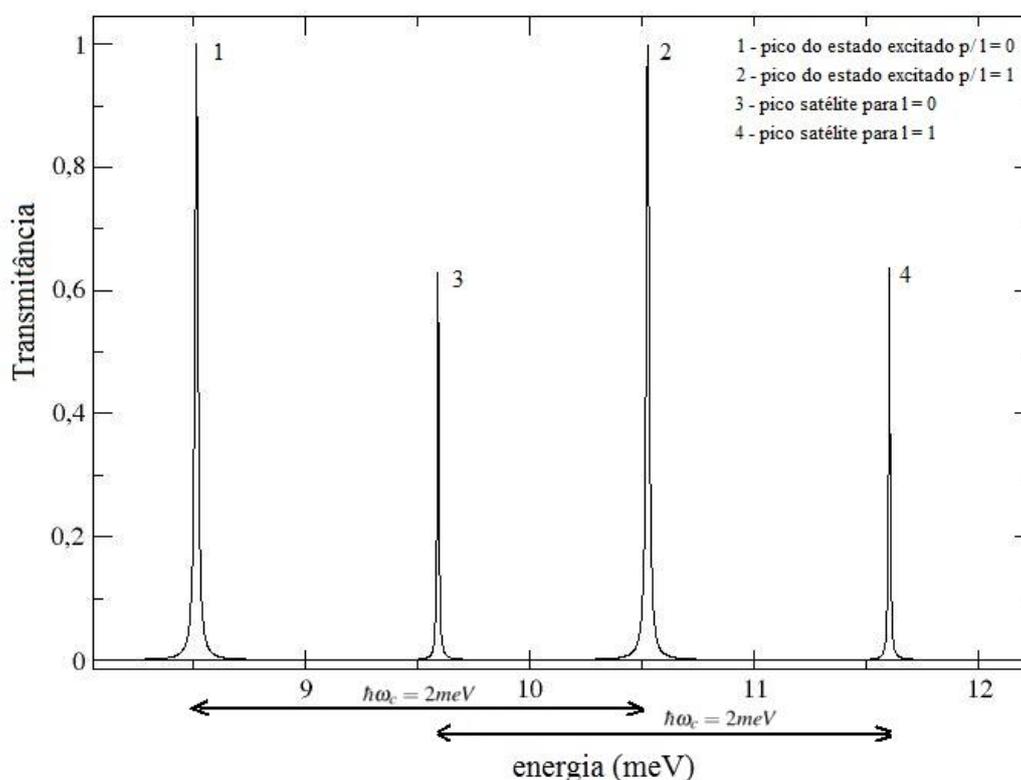


Figura 6.3 – Resultados que mostram a transmitância para diferentes níveis de Landau $p/\hbar\omega_c = 2meV$

No gráfico da figura (6.4) é mostrada a corrente total da HDB, à temperatura $T=15K$, e as contribuições provenientes dos canais sem emissão de fônons $f' = 0$ e com a emissão de fônons $f' = 1$, inicialmente na ausência de campo magnético. Nos cálculos das correntes, considerou-se o seguinte valor efetivo para interação elétron-fônons $\gamma = 0,45 meV$.

Mantendo-se o número de camadas das barreiras ($N_e = N_d = 20$ camadas) e variando-se em quatro camadas, para mais e para menos, o poço da HDB na configuração de ressonância ($N_p = 64, 70, 74$), verifica-se no gráfico da figura (6.5) que o valor máximo da corrente, proveniente da emissão de fônons ($f' = 1$), decai de um fator ~ 10 . Isto ocorre pois a diferença de energia entre os estados excitado e fundamental está próxima da energia do fônon LO quando o número de camadas do poço for igual a 70.

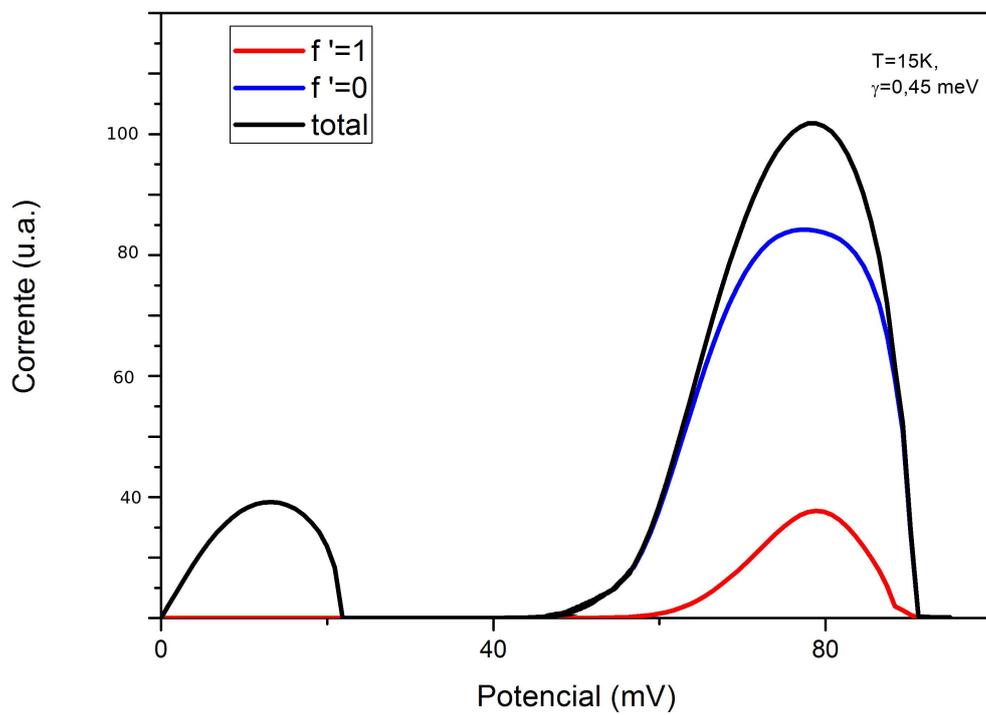


Figura 6.4 – Corrente que mostra a contribuição dos diferentes canais sem campo magnético

40

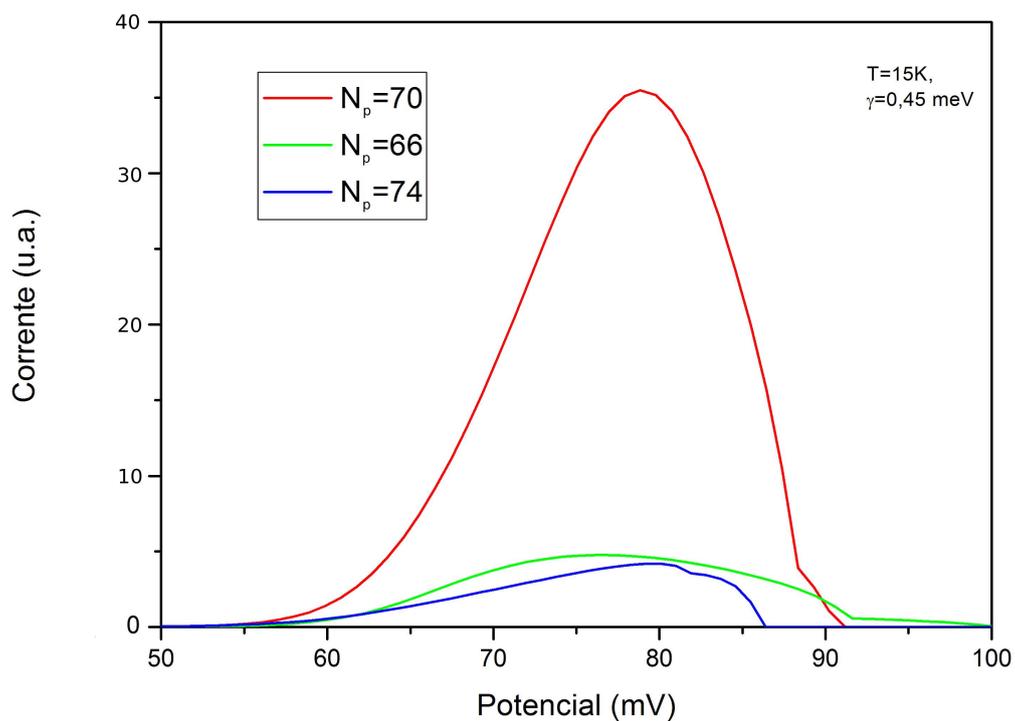


Figura 6.5 – Corrente proveniente da emissão de fônons ($f' = 1$) variando o número de camadas (N_d) do poço.

No gráfico (6.6) temos a corrente através da HDB considerando a presença de um campo magnético paralelo a corrente, a uma temperatura de $10K$. Nesta curva vemos as contribuições devidas aos canais sem emissão de fônons ($f' = 0$) e com emissão de fônons ($f' = 1$) para diferentes níveis de Landau. Neste caso foi aplicado um campo magnético $B \approx 0,59T$.

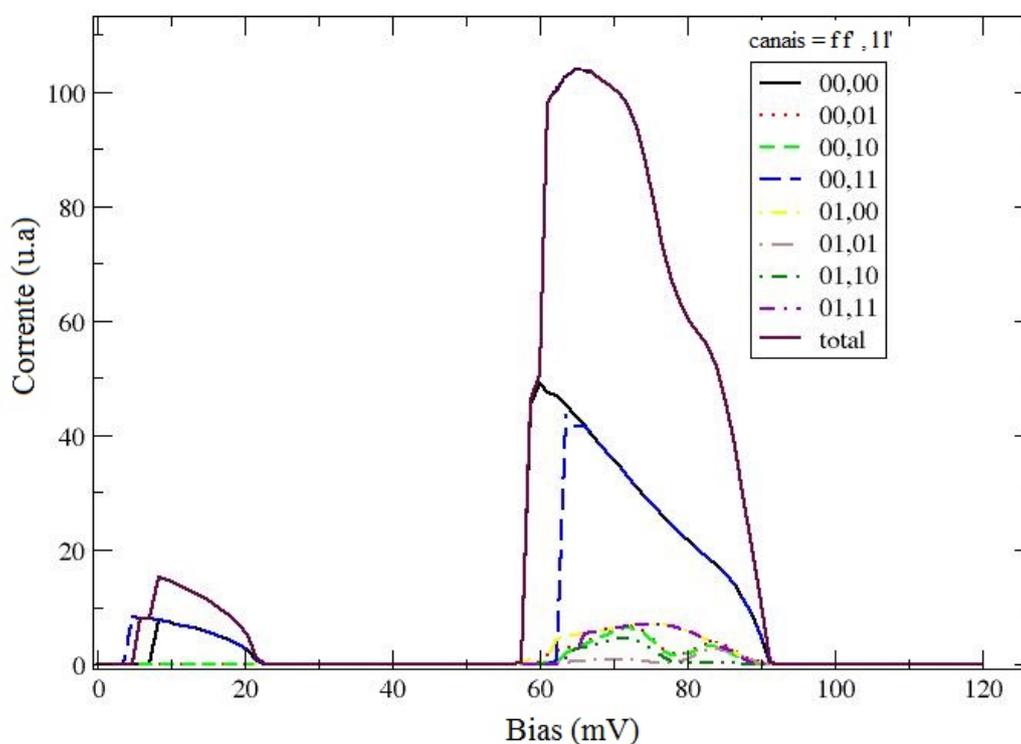


Figura 6.6 – Corrente que mostra a contribuição dos diferentes canais $p/\hbar\omega_c = 1meV$

Para diferentes valores do campo magnético aplicado na direção da corrente eletrônica, podemos plotar a curva característica I versus U (fig.(6.7)). Observamos uma diminuição no pico da corrente com o aumento do campo magnético. Consideramos $T = 15K$ na condição de ressonância e utilizando as camadas (20/70/20). A variação da corrente máxima com o campo magnético pode ser vista no gráfico (6.8).

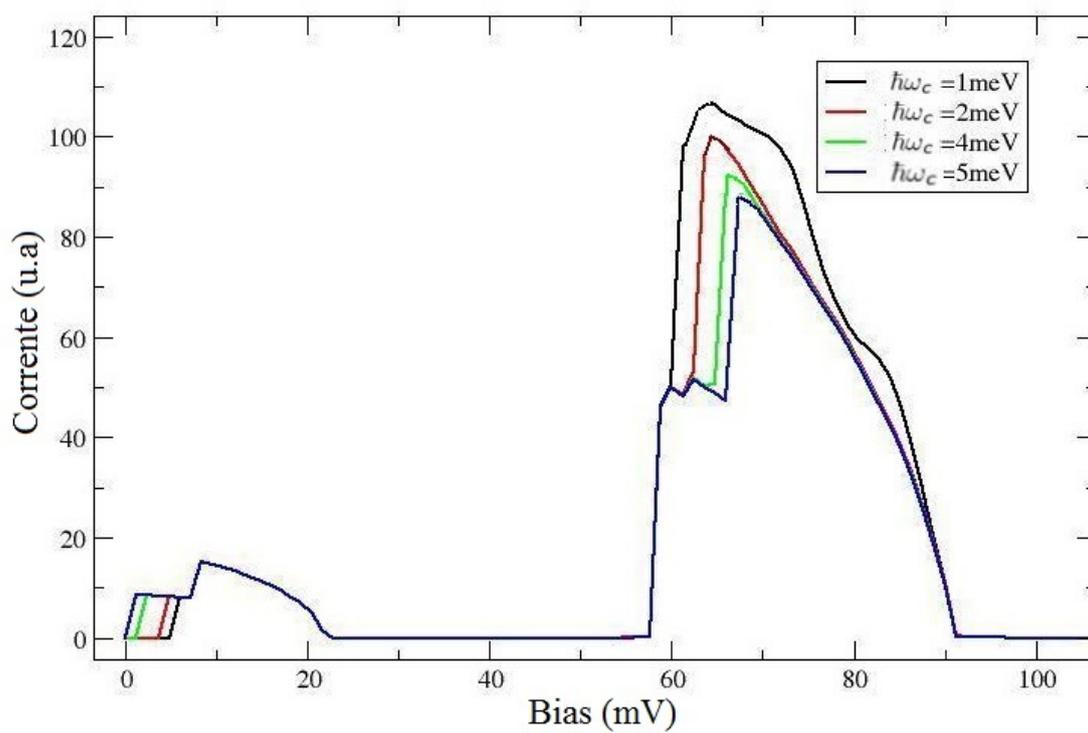


Figura 6.7 – Corrente total para diferentes valores da energia ciclotron.

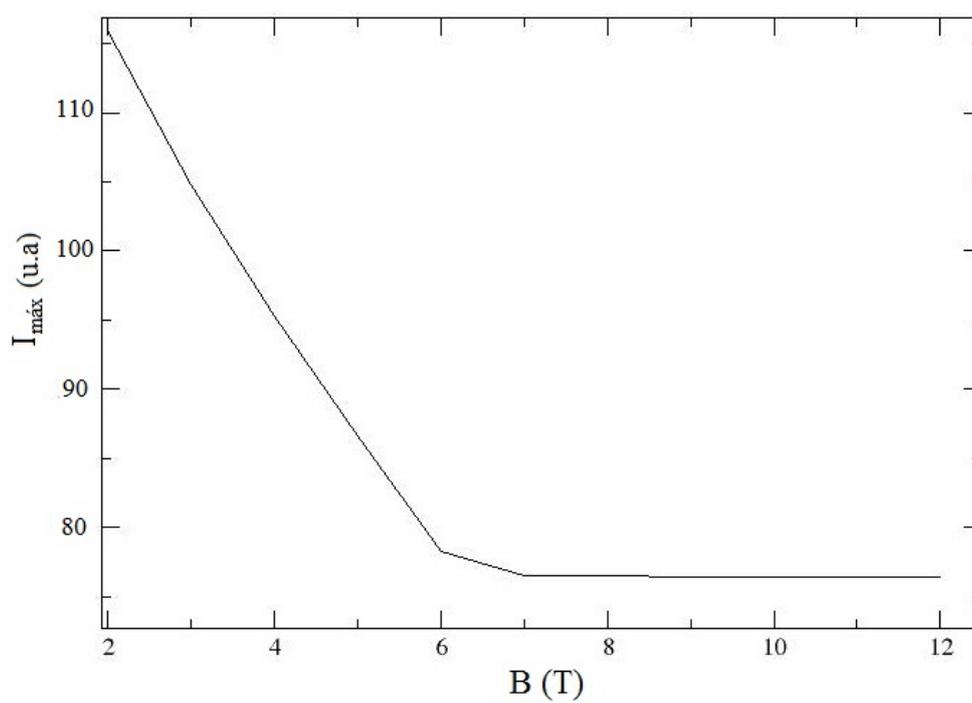


Figura 6.8 – Corrente máxima para diferentes valores de campo magnético.

Para calcular a emissão de fônons é importante considerar o efeito da acumulação de cargas no poço. Esta acumulação pode gerar uma instabilidade que modifica o funcionamento do dispositivo. Entretanto esta região de instabilidade é muito pequena dependendo das dimensões do dispositivo. A maneira prática de considerar a carga acumulada no poço é resolver autoconsistentemente a carga e o perfil de potencial [Porrás-Montenegro, Latgé e Anda 1992]. A partir de uma distribuição de cargas é possível calcular o perfil de potencial e, conseqüentemente, uma nova distribuição de cargas. Novos auto-estados no poço são gerados, os quais, por sua vez, geram uma nova corrente, novas taxas de escapes (R_0, R_1), uma nova densidade de carga e um novo potencial de interação o qual novamente é introduzido na parte eletrônica do hamiltoniano. Este processo termina quando há uma convergência na distribuição de cargas. Estes cálculos podem ser vistos com detalhe nos trabalhos [Guarnieri 2011, Barci 1996].

A partir do trabalho [Makler et al. 1998] foram escolhidos, para as equações cinéticas, os parâmetros $w = 7.5ps^{-1}$, $\tau = 10ps$, $\gamma_0 = 11ps^{-1}$. As taxas de escape são da ordem de $R_0 = 0.07ps^{-1}$ e $R_1 = 0.5ps^{-1}$. A área considerada para o dispositivo é $S = 0.5 \times 10^{-3} mm^2$ [Goldman, Tsui e Cunningham 1987].

Considerando as equações cinéticas, após o processo de autoconsistência, obtemos o fluxo de fônons TA que escapam do poço (Intensidade do saser) em função do potencial aplicado. Este resultado foi obtido para uma temperatura $T \approx 0K$ na condição de ressonância para diferentes valores de campos magnéticos (fig.(6.11)). Observa-se que a interação elétron-fônon começa em $U \approx 76.4mV$. O valor do fluxo de fônons TA tem seu valor máximo em $U \approx 84,6mV$. Percebe-se uma região de instabilidade na intensidade do saser devido a um processo de relaxação dos elétrons dentro do poço, em decorrência da emissão de fônons LO . Este processo leva a uma redistribuição das cargas no poço e conseqüentemente uma alteração no perfil do potencial. Com o acúmulo de cargas no poço, ocorre uma elevação nos níveis do poço e, conseqüentemente, uma diminuição da diferença de energia do estado fundamental e excitado. O que leva o sistema para fora da ressonância (fig.(6.9)). Nesta condição, a carga acumulada no poço tende a diminuir fazendo com que os níveis de energias decresçam em relação a energia de Fermi do emissor, conseqüentemente, aumentando-se a separação energética dos dois níveis de menor energia. Isto faz o sistema retornar à condição de ressonância (fig.(6.10)). Este conjunto de fatores explica o aparecimento das oscilações do gráfico (fig.(6.11)). Com um aumento do campo magnético, observa-se uma diminuição na região de instabilidade.

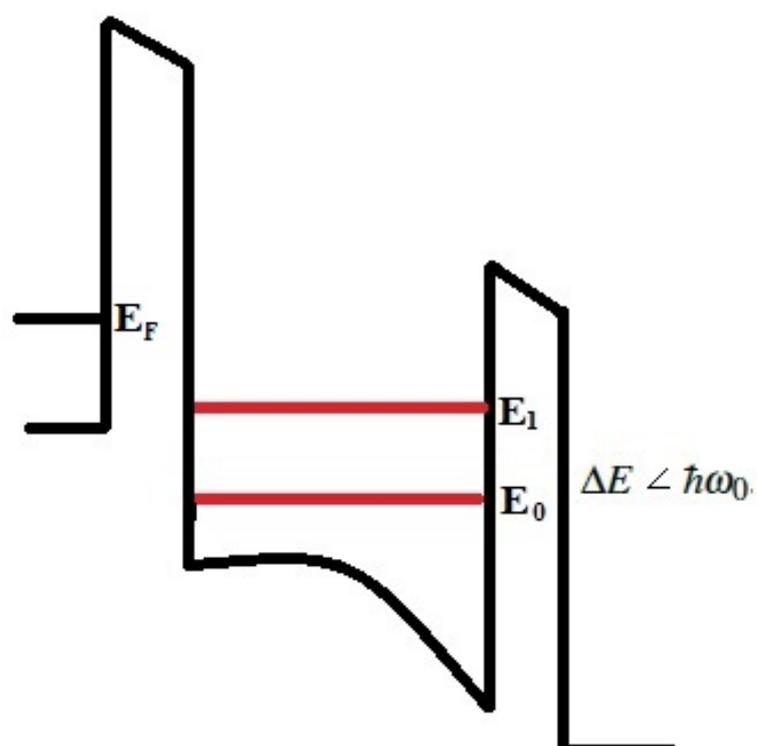


Figura 6.9 – Sistema fora da ressonância. O acúmulo de carga eleva os níveis do poço.

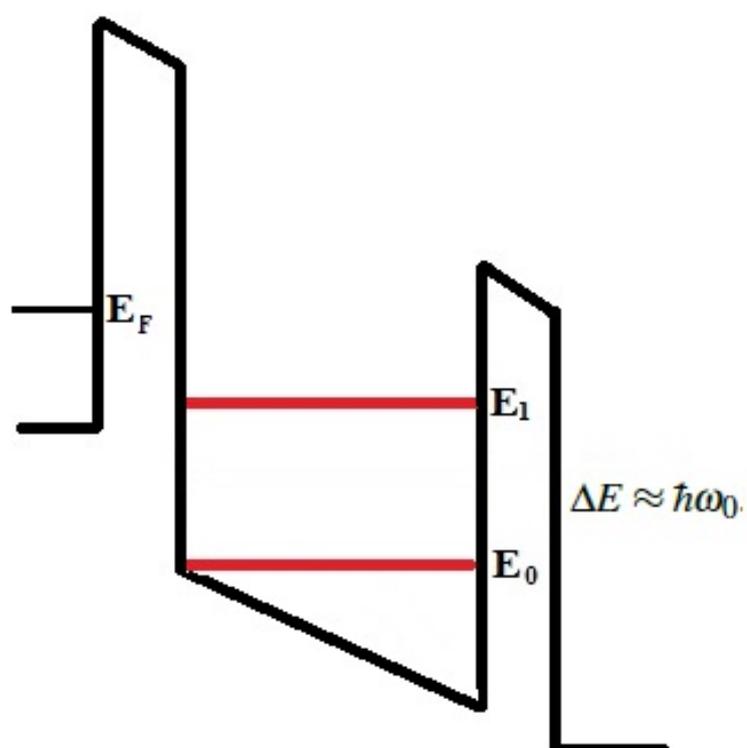


Figura 6.10 – Sistema na ressonância

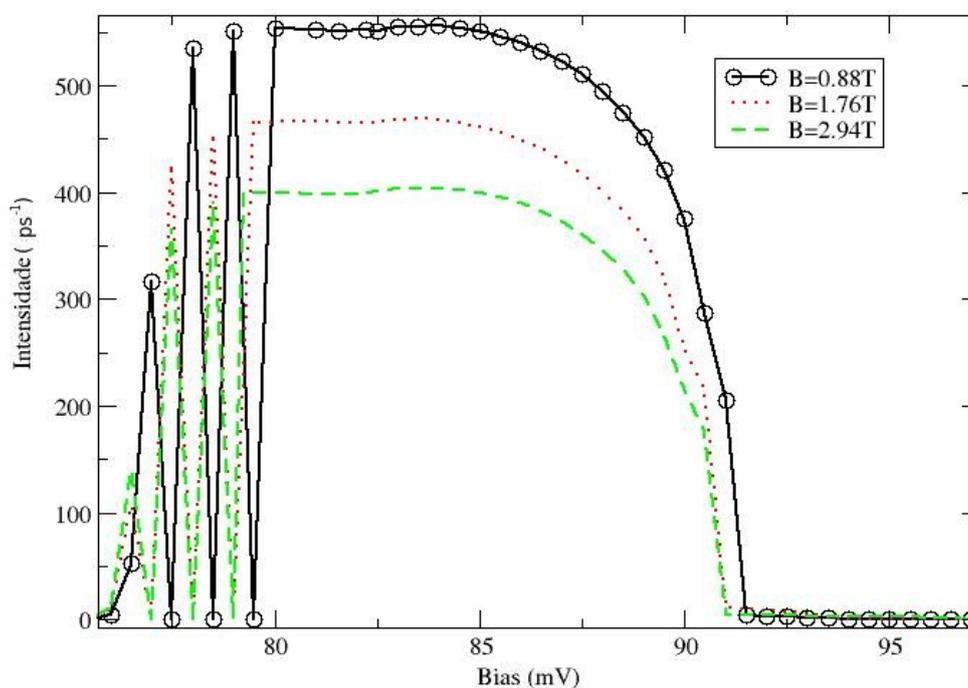


Figura 6.11 – Intensidade do saser para diferentes valores de campo magnético para $T \approx 0K$.

Aumentado-se a temperatura do dispositivo de $T \approx 0K$ para $T \approx 100K$, plotamos a intensidade do saser para diferentes campos magnéticos (fig.(6.12)). Comparando o gráfico (6.12) com o gráfico (6.11) vemos um aumento da intensidade do saser com o aumento da temperatura e também um aumento da região de instabilidade, começando para valores de menor potencial. Isto ocorre pois para $T \approx 100K$, os elétrons próximos ao nível de Fermi são excitados para energias ainda maiores, de forma que caem no poço para potenciais aplicados maiores. Pode-se notar que a intensidade não vai a zero no final das curvas, como ocorre para $T \approx 0K$, pois os elétrons no segundo estado excitado interferem no primeiro estado excitado com o aumento da temperatura.

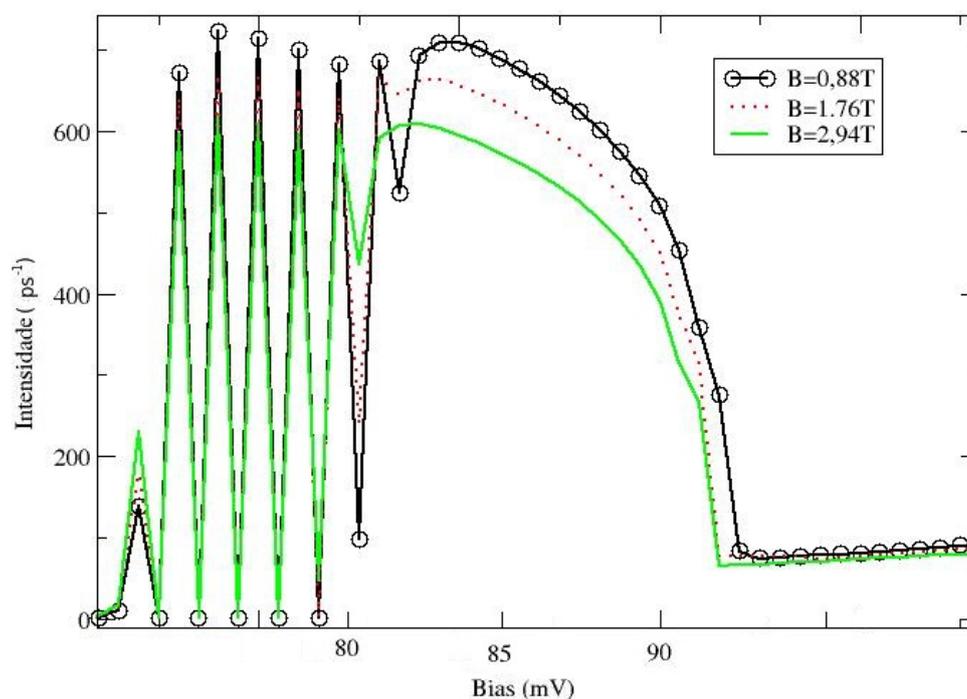


Figura 6.12 – Intensidade do saser para diferentes valores de campo magnético para $T \approx 100K$.

Modificando a barreira da direita de 20 camadas para 11 camadas temos a configuração de uma dupla barreira assimétrica para $T \approx 0K$, em que o limiar da emissão de fônons ocorre para $U = 67.5mV$ (fig.(6.13)). Nota-se, novamente, uma diminuição na intensidade do saser com o aumento do campo magnético aplicado. Neste caso percebe-se o não aparecimento da região de instabilidade, já que os elétrons que atravessam a barreira da esquerda ficam confinados por um período de tempo muito curto no poço, por causa da diminuição da barreira direita.

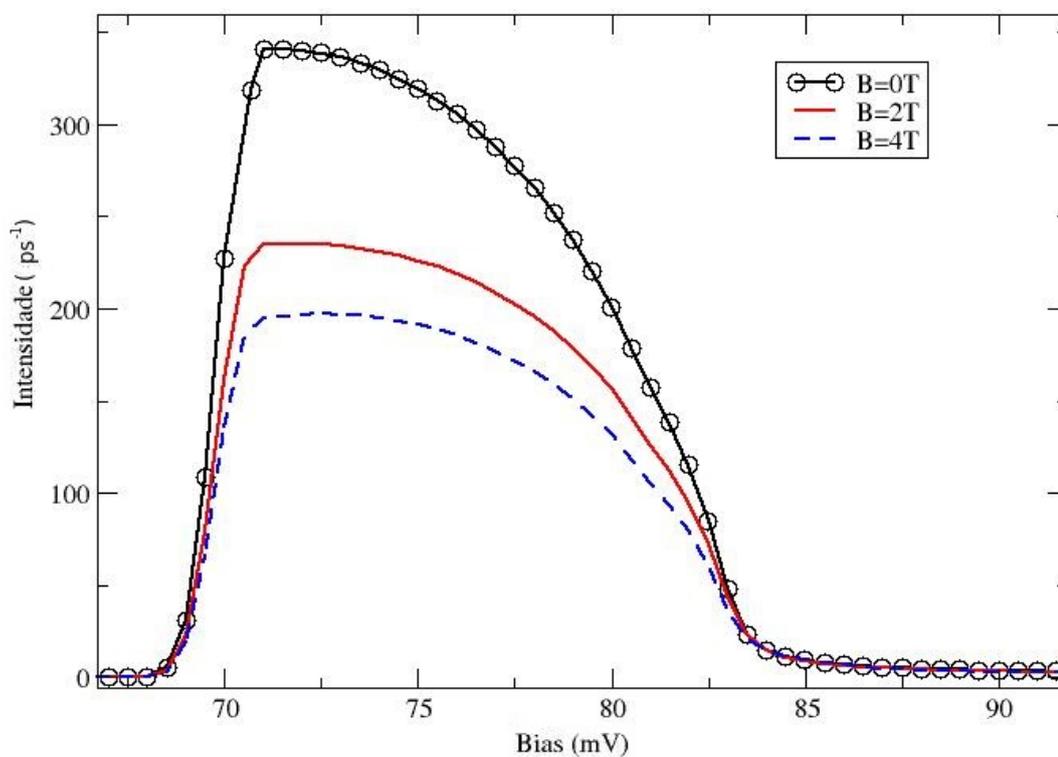


Figura 6.13 – Intensidade do saser para dupla barreira assimétrica (20/70/11) para $T \approx 0K$.

Para esta configuração assimétrica da heteroestrutura, as cargas injetadas no poço não modificam de maneira acentuada os níveis de energia. Logo o limiar de emissão de fônons TA se mantém em $U = 67.5mV$ para uma temperatura $T \approx 70K$, veja a figura (6.14).

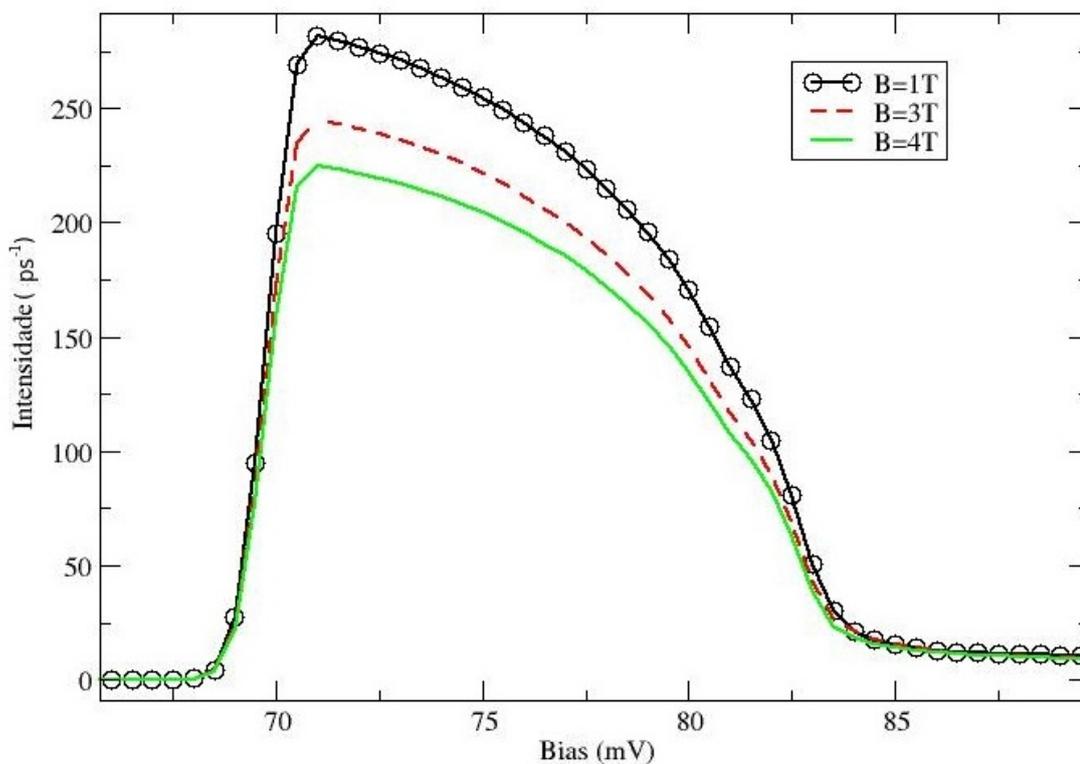


Figura 6.14 – Intensidade do saser para dupla barreira assimétrica (20/70/11) para $T \approx 70K$.

Fixando o campo magnético em $B = 1T$ e aumentando a barreira da direita de 20 para 21, para $T \approx 100K$ (fig.(6.15)), nota-se um aumento da região de instabilidade do fluxo de fônons. Com o aumento da barreira da direita, o tempo de permanência das cargas ressonando no poço aumenta, o que explica um aumento na intensidade do saser.

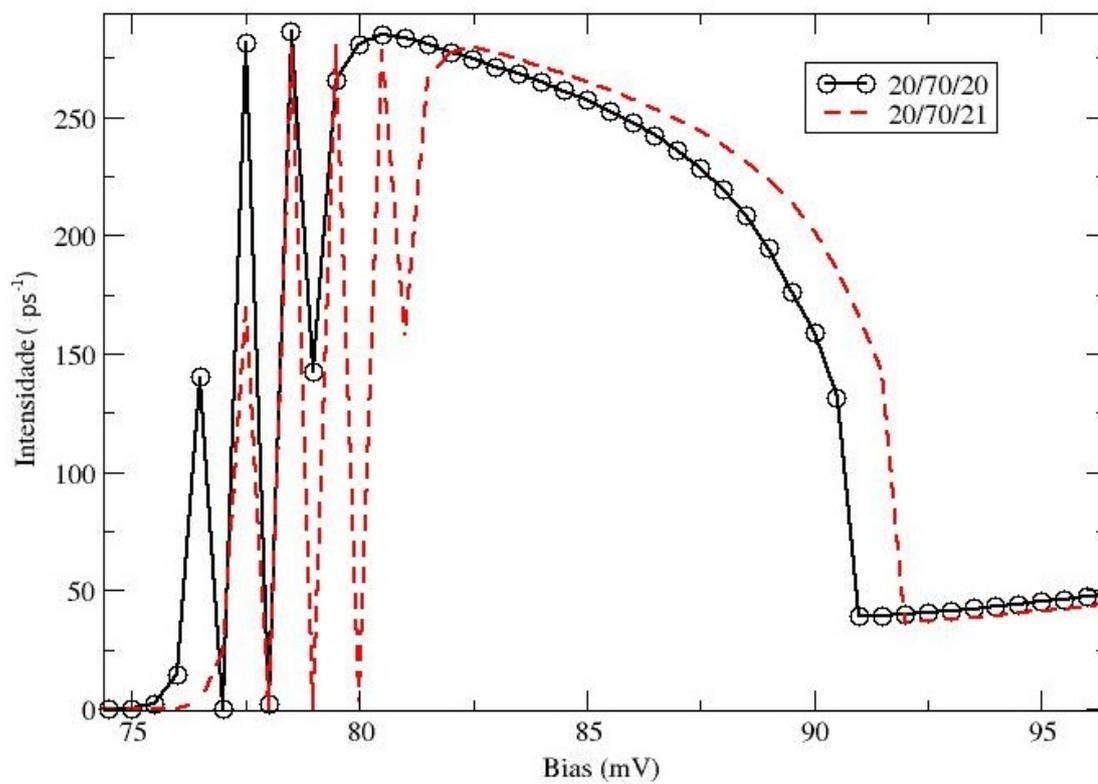


Figura 6.15 – Intensidade do saser para dupla barreira assimétrica (20/70/21) para $B = 1T$.

CAPÍTULO 7

Conclusões

Nesta tese foi proposto, pela primeira vez, o estudo do magnetotunelamento através de um emissor contínuo de fônons TA coerentes (saser). O transporte eletrônico foi estudado via funções de Green fora do equilíbrio, na presença de um campo magnético externo. Tais funções de Green foram calculadas através das equações de Dyson e um processo de dizimação que inclui todos os estados da HDB. A dependência do sistema com a temperatura foi introduzida através do formalismo Keldysh fora do equilíbrio, já que um potencial externo foi aplicado no dispositivo. O fluxo de fônons no poço foi calculado resolvendo as equações cinéticas adequadas. O perfil do potencial e a distribuição de carga no poço são calculados por um processo auto-consistente.

Na ausência de campo magnético vimos que os canais com, $f' = 1$ e sem emissão de fônons, $f' = 0$, contribuem para a corrente eletrônica (fig. (6.4)) na condição de ressonância em que o número de camadas no poço é $N_p = 70$. Quando variamos o número de camadas do poço (fig. (6.5)) a corrente proveniente do canal de fônons, $f' = 1$, decai rapidamente, de forma que o sistema sai da ressonância.

A presença de um campo magnético externo abre 8 canais para transição eletrônica como visto nos diagramas (5.4) e (5.5). A figura (6.6) mostra a corrente eletrônica total e os respectivos canais na condição de ressonância.

Comparando os gráficos (6.4) e (6.6) observamos uma diminuição na largura da corrente total. Sem aplicação do campo magnético (6.4) a corrente total quando o estado excitado passa abaixo do nível de Fermi começa em $U = 48.2mV$ e termina em $U = 90mV$. Quando o campo magnético é aplicado a corrente total correspondente (6.6) começa em $U = 58.7mV$ e termina em $U = 90mV$. Isto mostra que a aplicação do campo magnético diminui a largura da corrente, o que restringe o tunelamento dos elétrons pela HDB.

A intensidade do saser foi analisada para diferentes campos magnéticos e temperaturas. No caso da HDB simétrica (fig.(6.11)) e (fig.(6.12)) observamos uma diminuição do pico da

intensidade do saser e da região de instabilidade com o aumento do campo magnético. No caso da HDB com barreiras assimétricas (fig.(6.13)) a região de instabilidade desaparece. Isto mostra que além de modificar a largura das barreiras pode-se alterar a intensidade do campo magnético afim de diminuir a instabilidade do dispositivo.

Com o aumento do campo magnético ocorreu, também, um estreitamento das curvas da intensidade do saser, oque seleciona ainda mais a emissão dos fônons TA .

A aplicação de um campo magnético externo coloca uma restrição adicional aos estados eletrônicos paralelos às interfaces da HDB. Isto facilita a seleção de um modo fonônico que escraviza todos outros modos dentro do poço, possibilitando que o limite para a emissão de fônons TA coerentes (sasing) seja atingido mais facilmente. Em vez de sub-bandas eletrônicas relacionadas com cada pico ressonante, temos estados de energia degenerados, denominados níveis de Landau. Isso força a emissão de um conjunto mais restrito de fônons primários LO_1 e, conseqüentemente, modos TA .

REFERÊNCIAS

- ALMANSOUR, S. A.; HASSEN, D. *Optics and Photonics*, v. 2014, 2014.
- ANDA, E.; FLORES, F. *J. Phys. Condens. Matter*, v. 3, p. 9087, 1991.
- BARCI, D. E. T. de. *Tunelamento Ressonante e Geração de Som Coerente, Tese de doutorado, Instituto de Física. Universidade Federal Fluminense*. [S.l.: s.n.], 1996.
- BEZUGLYI, E. V.; SHUMEIKO, V. *Physica C: Superconductivity*, v. 499, p. 15–23, 2015.
- BOEBINGER, G. et al. *Phys. Rev. Lett.*, v. 65, p. 235, 1990.
- CAMPS, I. et al. *Phys. Rev. B*, v. 64, p. 125311, 2001.
- CHANG, L.; ESAKI, L.; TSU., R. *Appl. Phys. Lett.*, v. 24, p. 593, 1974.
- CHANG, Z. et al. *IEEE J. Sel. Top. Quantum Electr.*, v. 4, p. 266 – 270, 1998.
- EAVES, L.; HAYDEN, R.; LEADBEATR, M. *Surface Science*, v. 263, p. 199, 1992.
- GOLDMAN, V.; TSUI, D.; CUNNINGHAM, J. *Phys. Rev. Lett.*, v. 58, p. 1256, 1987.
- GOLDMAN, V.; TSUI, D.; CUNNINGHAM, J. *Phys. Rev. B*, v. 36, p. 7635, 1987.
- GORNIK, E. et al. *Granular Nanoelectronics*, v. 251, p. 155, 2013.
- GUARNIERI, L. C. *Transporte Eletrônico Quântico em uma Heteroestrutura de Dupla Barreira (HDB) assistido por Fônons, Tese de doutorado, Instituto de Física. Universidade Federal de Juiz de Fora*. [S.l.: s.n.], 2011.
- GUARNIERI, L. C.; ANJOS, V.; MAKLER, S. S. *Journal of superconductivity and novel magnetism*, v. 26, p. 2235–2238, 2013.
- GUTIÉRREZ, H.; PORRAS-MONTENEGRO, N.; LATGÉ, A. *Physical Review B*, v. 68, p. 045311, 2003.
- GUTIÉRREZ, H.; PORRAS-MONTENEGRO, N.; LATGÉ, A. *Journal of Applied Physics*, v. 95, p. 4890, 2004.
- HAUG, H.; JAUHO, A. *Quantum kinetics in transport and optics of semiconductors*, springer. p. 67, 1996.

- HAUG, H.; JAUHO, A. Quantum kinetics in transport and optics of semiconductors, springer. p. 71, 1996.
- HAUG, H.; JAUHO, A. P. Quantum kinetics in transport and optics of semiconductors, springer. p. 62, 1996.
- JACOB, J. et al. *Sol. State Comm*, v. 91, p. 721, 1994.
- JONSON, M. *Phys. Rev. B*, v. 39, p. 5924, 1989.
- JUSSERAND, B. et al. *Appl. Phys. Lett.*, v. 57, p. 560, 1990.
- KELDysh, L. *Soviet Phys. JETP*, v. 4, p. 1018, 1965.
- KHALIL, H. M. et al. *Materials Science and Engineering: B*, v. 177, p. 729–733, 2012.
- KONDRYUK, D. V. et al. *Semiconductor Physics, Quantum Electronics & Optoelectronics*, 2015.
- LAKE, R.; KLIMECK, G.; DATTA, S. *Phys. Rev. B*, v. 47, p. 6427, 1993.
- LANDAUER, R. *IBM Journal of Research and Development*, v. 1, p. 223, 1957.
- LANGRETH, D. Linear and nonlinear electron transport in solids. 1976.
- LICARI, J.; EVRAD, R. *Phys. Rev. B*, v. 15, p. 2254, 1977.
- MAHAN, G. Many particle physics. p. 88, 1990.
- MAHAN, G. Many particle physics. p. 202, 1990.
- MAHAN, G. Many particle physics. p. 95, 1990.
- MAHAN, G. Many particle physics. p. 123, 1990.
- MAHAN, G. Many particle physics. p. 140, 1990.
- MAKLER, S. S. et al. *Journal of Phys*, v. 24, p. 330, 1994.
- MAKLER, S. S. et al. *Journal of Phys. Condens.*, v. 10, p. 5905, 1998.
- MEIR, Y.; WINGREEN, N. *Phys. Rev. Lett.*, v. 68, p. 2512, 1992.
- PAREDES, H.; RIOS, C. L. B.; ARCE, J. C. *Journal of Physics: Conference series*, p. 012079, 2016.
- POPOV, V. G. et al. *Journal of Experimental and Theoretical Physics*, v. 111, p. 220, 2010.
- PORRAS-MONTENEGRO, N.; LATGÉ, A.; ANDA, E. *Phys. Stat. Sol. b*, v. 171, 1992.
- RAMMER, H. S. J. *J. Phys. Condens.*, v. 10, p. 5905, 1998.
- RODRIGUES, I. C. *Estudo das propriedades eletrônicas e de emissão de uma laser de fônons*. [S.l.: s.n.], 2001. 54 p.
- RUNDQUIST, A. et al. *Science*, v. 10, p. 5905 – 5921, 1998.
- STONE, A. *Physics of Nanostructures*, ed. Davies, J. H. and Long, A. R., p. 65, 1991.

- ULBRICH, R. et al. *Phys. Rev. Lett.*, v. 17, p. 1432, 1980.
- USEINOV, N. K.; PETUKHOV, D. A.; TAGIROV, L. R. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, v. 373, p. 27–29, 2015.
- VALLÉE, F.; BOGANI, F. *Phys. Rev. B*, v. 43, p. 12049, 1991.
- VANDENBERGHE, W. et al. *Journal of Applied Physics*, v. 109, p. 124503, 2011.
- WANG, M. J.; YUE, F. Y.; GUO, F. M. *Advances in Condensed Matter Physics*, v. 2015, 2015.
- WEBERSZPIL, J. *Dinâmica de um gerador de fônons coerentes (SASER)*, Tese de doutorado, Instituto de Física. Universidade Federal Fluminense. [S.l.: s.n.], 1997.
- YAN, Z.; LIANG, X. *Journal of Applied Physics*, v. 91, p. 724, 2012.
- YERANOSYAN, A. M. et al. *Physica B: Condensed Matter*, v. 456, p. 365–370, 2015.
- YU, Z.; BOSECK, S. *Rev. Mod. Phys.*, v. 67, p. 863 – 891, 1995.
- ZIMAN, J. M. *Electrons and Phonons. The Theory of Transport Phenomena in Solids*. [S.l.: s.n.], 1972.
- ZOU, N.; CHAO, K.; GALPERIN, Y. *Phys. Rev. Lett.*, v. 71, p. 1756, 1993.

APÊNDICE A

Fórmula de Bolz-Banachiewicz e obtenção da matriz \mathbf{M}

Neste apêndice iremos provar a fórmula de Bolz-Banachiewicz para obtenção da inversa de uma matriz dada por blocos. Em seguida usaremos esta fórmula para achar a matriz \mathbf{M} , necessária para resolver a equação (5.1.105).

Seja uma matriz \mathbf{P} 12×12 dada por blocos 6×6 .

$$\mathbf{P} = \begin{pmatrix} \mathbf{P}_{00} & \mathbf{P}_{01} \\ \mathbf{P}_{10} & \mathbf{P}_{11} \end{pmatrix}. \quad (\text{A.0.1})$$

A fórmula de Bolz-Banachiewicz define a matriz inversa de \mathbf{P} como:

$$\mathbf{P}^{-1} = \begin{pmatrix} \mathbf{P}_{00}^{-1} + \mathbf{P}_{00}^{-1} \mathbf{P}_{01} \Delta \mathbf{P}_{10} \mathbf{P}_{00}^{-1} & -\mathbf{P}_{00}^{-1} \mathbf{P}_{01} \Delta \\ -\Delta \mathbf{P}_{10} \mathbf{P}_{00}^{-1} & \Delta \end{pmatrix}, \quad (\text{A.0.2})$$

com $\Delta = (\mathbf{P}_{11} - \mathbf{P}_{10} \mathbf{P}_{00}^{-1} \mathbf{P}_{01})^{-1}$.

No problema deste trabalho, interessa o caso em que $\mathbf{P}_{00} = \mathbf{P}_{11} = \mathbf{1}$, logo $\mathbf{P}_{00}^{-1} = \mathbf{1}$ e $\Delta = (\mathbf{1} - \mathbf{P}_{10} \mathbf{P}_{01})^{-1}$, então:

$$\mathbf{P} = \begin{pmatrix} \mathbf{1} & \mathbf{P}_{01} \\ \mathbf{P}_{10} & \mathbf{1} \end{pmatrix} \quad (\text{A.0.3})$$

e

$$\mathbf{P}^{-1} = \begin{pmatrix} \mathbf{1} + \mathbf{P}_{01} \Delta \mathbf{P}_{10} & -\mathbf{P}_{01} \Delta \\ -\Delta \mathbf{P}_{10} & \Delta \end{pmatrix}. \quad (\text{A.0.4})$$

Para provar que (A.0.4) pode ser utilizada na obtenção da matriz inversa deveremos ter que $\mathbf{P} \mathbf{P}^{-1} = \mathbf{1}$.

Fazendo o produto de (A.0.1) com (A.0.2) chegamos à:

$$\mathbf{P}\mathbf{P}^{-1} = \begin{pmatrix} \mathbf{1} + \mathbf{P}_{01}\Delta\mathbf{P}_{10} - \mathbf{P}_{01}\Delta\mathbf{P}_{10} & -\mathbf{P}_{01}\Delta + \mathbf{P}_{01}\Delta \\ -\mathbf{P}_{10} + \mathbf{P}_{10}\mathbf{P}_{01}\Delta\mathbf{P}_{10} - \Delta\mathbf{P}_{10} & \Delta - \mathbf{P}_{10}\mathbf{P}_{01}\Delta \end{pmatrix}. \quad (\text{A.0.5})$$

Vemos que o elemento da 1ª linha e 1ª coluna é a identidade e o elemento da 1ª linha e 2ª coluna se anula. Para o elemento da 2ª linha e 1ª coluna temos,

$$\mathbf{P}_{10} + (\mathbf{P}_{10}\mathbf{P}_{01} - \mathbf{1})\Delta\mathbf{P}_{10} = \mathbf{P}_{10} + (-\Delta^{-1})\Delta\mathbf{P}_{10} = \mathbf{P}_{10} - \mathbf{P}_{01} = \mathbf{0}.$$

Para o elemento da 2ª linha e 2ª coluna fica,

$$\Delta - \mathbf{P}_{10}\mathbf{P}_{01}\Delta = (\mathbf{1} - \mathbf{P}_{10}\mathbf{P}_{01})\Delta = \Delta^{-1}\Delta = \mathbf{1}.$$

Finalmente podemos concluir que:

$$\mathbf{P}\mathbf{P}^{-1} = \begin{pmatrix} \mathbf{1} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{1} \end{pmatrix} \quad (\text{A.0.6})$$

Aplicaremos a fórmula (A.0.4) para obter a matriz

$$\mathbf{M} = (\overline{\mathbf{M}})^{-1} = \begin{pmatrix} \mathbf{1} + \overline{\mathbf{M}}_{01}\Delta\overline{\mathbf{M}}_{10} & -\overline{\mathbf{M}}_{01}\Delta \\ -\Delta\overline{\mathbf{M}}_{10} & \Delta \end{pmatrix}, \quad (\text{A.0.7})$$

em que a matriz $\overline{\mathbf{M}}$ pode ser escrita em quatro blocos 6×6 .

$$\overline{\mathbf{M}} = \begin{pmatrix} \overline{\mathbf{M}}_{00} & \overline{\mathbf{M}}_{01} \\ \overline{\mathbf{M}}_{10} & \overline{\mathbf{M}}_{11} \end{pmatrix}. \quad (\text{A.0.8})$$

No nosso problema $\overline{\mathbf{M}}_{00} = \overline{\mathbf{M}}_{11} = \mathbf{1}$, em que

$$\mathbf{1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

O bloco $\overline{\mathbf{M}}_{01}$ será,

$$\overline{\mathbf{M}}_{01} = \begin{pmatrix} 0 & -G_{10'}^{01,00}(\gamma_{10}) & 0 & 0 & -G_{11'}^{00,00}(\gamma_{01}) & 0 \\ 0 & -G_{1'0'}^{01,00}(\gamma_{10}) & 0 & 0 & -G_{1'1'}^{00,00}(\gamma_{01}) & 0 \\ 0 & -G_{10'}^{01,00}(\gamma_{10}) & 0 & 0 & -G_{11'}^{00,00}(\gamma_{01}) & 0 \\ 0 & -G_{10'}^{11,00}(\gamma_{10}) & 0 & 0 & -G_{11'}^{10,00}(\gamma_{01}) & 0 \\ 0 & -G_{0'0'}^{11,00}(\gamma_{10}) & 0 & 0 & -G_{0'1'}^{10,00}(\gamma_{01}) & 0 \\ 0 & -G_{10'}^{11,00}(\gamma_{10}) & 0 & 0 & -G_{11'}^{10,00}(\gamma_{01}) & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{A.0.9})$$

e os elementos do bloco $\overline{\mathbf{M}}_{10}$ fica:

$$\overline{\mathbf{M}}_{10} = \begin{pmatrix} 0 & -G_{10''}^{01,11}(\gamma_{01}) & 0 & 0 & -G_{11''}^{00,11}(\gamma_{10}) & 0 \\ 0 & -G_{1''0''}^{01,11}(\gamma_{01}) & 0 & 0 & -G_{1''1''}^{00,11}(\gamma_{10}) & 0 \\ 0 & -G_{10''}^{01,11}(\gamma_{01}) & 0 & 0 & -G_{11''}^{00,11}(\gamma_{10}) & 0 \\ 0 & -G_{10''}^{11,11}(\gamma_{01}) & 0 & 0 & -G_{11''}^{10,11}(\gamma_{10}) & 0 \\ 0 & -G_{0''0''}^{11,11}(\gamma_{01}) & 0 & 0 & -G_{11''}^{10,11}(\gamma_{10}) & 0 \\ 0 & -G_{10''}^{11,11}(\gamma_{01}) & 0 & 0 & -G_{11''}^{10,11}(\gamma_{10}) & 0 \end{pmatrix}. \quad (\text{A.0.10})$$

A fim de simplificar as expressões, vamos chamar os elementos de $\overline{\mathbf{M}}_{01}$ por m_{ij} e os elementos de $\overline{\mathbf{M}}_{10}$ por b_{ij} da forma:

$$\overline{\mathbf{M}}_{01} = \begin{pmatrix} 0 & m_{12} & 0 & 0 & m_{15} & 0 \\ 0 & m_{22} & 0 & 0 & m_{25} & 0 \\ 0 & m_{32} & 0 & 0 & m_{35} & 0 \\ 0 & m_{42} & 0 & 0 & m_{45} & 0 \\ 0 & m_{52} & 0 & 0 & m_{55} & 0 \\ 0 & m_{62} & 0 & 0 & m_{65} & 0 \end{pmatrix}, \quad (\text{A.0.11})$$

$$\overline{\mathbf{M}}_{10} = \begin{pmatrix} 0 & b_{12} & 0 & 0 & b_{15} & 0 \\ 0 & b_{22} & 0 & 0 & b_{25} & 0 \\ 0 & b_{32} & 0 & 0 & b_{35} & 0 \\ 0 & b_{42} & 0 & 0 & b_{45} & 0 \\ 0 & b_{52} & 0 & 0 & b_{55} & 0 \\ 0 & b_{62} & 0 & 0 & b_{65} & 0 \end{pmatrix}. \quad (\text{A.0.12})$$

Considerando estas definições, vamos utilizar a fórmula (A.0.7) para determinar a matriz $\mathbf{M} = (\overline{\mathbf{M}})^{-1}$. Para isso, teremos os termos:

$$\mathbf{1} - \overline{\mathbf{M}}_{10}\overline{\mathbf{M}}_{01} = \begin{pmatrix} 1 & -b_{12}m_{22} - b_{15}m_{52} & 0 & 0 & -b_{12}m_{25} - b_{15}m_{55} & 0 \\ 0 & 1 - b_{22}m_{22} - b_{25}m_{52} & 0 & 0 & -b_{22}m_{25} - b_{25}m_{55} & 0 \\ 0 & -b_{32}m_{22} - b_{35}m_{52} & 1 & 0 & -b_{32}m_{25} - b_{35}m_{55} & 0 \\ 0 & -b_{42}m_{22} - b_{45}m_{52} & 0 & 1 & -b_{42}m_{25} - b_{45}m_{55} & 0 \\ 0 & -b_{52}m_{22} - b_{55}m_{52} & 0 & 0 & 1 - b_{52}m_{25} - b_{55}m_{55} & 0 \\ 0 & -b_{62}m_{22} - b_{65}m_{52} & 0 & 0 & -b_{62}m_{25} - b_{65}m_{55} & 1 \end{pmatrix}. \quad (\text{A.0.13})$$

Para determinar o bloco $\Delta = (\mathbf{1} - \overline{\mathbf{M}}_{10}\overline{\mathbf{M}}_{01})^{-1}$, da fórmula (A.0.7), basta inverter a matriz (A.0.13). Após algum trabalho, chegamos:

$$\Delta = \begin{pmatrix} 1 & \delta_{12} & 0 & 0 & \delta_{15} & 0 \\ 0 & \delta_{22} & 0 & 0 & \delta_{25} & 0 \\ 0 & \delta_{32} & 1 & 0 & \delta_{35} & 0 \\ 0 & \delta_{42} & 0 & 1 & \delta_{45} & 0 \\ 0 & \delta_{52} & 0 & 0 & \delta_{55} & 0 \\ 0 & \delta_{62} & 0 & 0 & \delta_{65} & 1 \end{pmatrix}, \quad (\text{A.0.14})$$

onde os elementos são,

$$\delta_{12} = \frac{(b_{12}m_{22} + b_{15}m_{52})(1 - b_{52}m_{25} - b_{55}m_{55}) + (b_{12}m_{25} + b_{15}m_{55})(b_{52}m_{22} + b_{55}m_{52})}{(1 - b_{22}m_{22} - b_{25}m_{52})(1 - b_{52}m_{25} - b_{55}m_{55}) - (b_{52}m_{22} + b_{55}m_{52})(b_{22}m_{25} + b_{25}m_{55})},$$

$$\delta_{15} = \frac{(b_{12}m_{22} + b_{15}m_{52})(b_{22}m_{25} + b_{25}m_{55}) + (b_{12}m_{25} + b_{15}m_{55})(1 - b_{22}m_{22} - b_{25}m_{52})}{(1 - b_{22}m_{22} - b_{25}m_{52})(1 - b_{52}m_{25} - b_{55}m_{55}) - (b_{52}m_{22} + b_{55}m_{52})(b_{22}m_{25} + b_{25}m_{55})},$$

$$\delta_{22} = \frac{1 - b_{52}m_{25} - b_{55}m_{55}}{(1 - b_{22}m_{22} - b_{25}m_{52})(1 - b_{52}m_{25} - b_{55}m_{55}) - (b_{52}m_{22} + b_{55}m_{52})(b_{22}m_{25} + b_{25}m_{55})},$$

$$\delta_{25} = \frac{b_{22}m_{25} + b_{25}m_{55}}{(1 - b_{22}m_{22} - b_{25}m_{52})(1 - b_{52}m_{25} - b_{55}m_{55}) - (b_{52}m_{22} + b_{55}m_{52})(b_{22}m_{25} + b_{25}m_{55})},$$

$$\delta_{32} = \frac{(b_{32}m_{22} + b_{35}m_{52})(1 - b_{52}m_{25} - b_{55}m_{55}) + (b_{32}m_{25} + b_{35}m_{55})(b_{52}m_{22} + b_{55}m_{52})}{(1 - b_{22}m_{22} - b_{25}m_{52})(1 - b_{52}m_{25} - b_{55}m_{55}) - (b_{52}m_{22} + b_{55}m_{52})(b_{22}m_{25} + b_{25}m_{55})},$$

$$\delta_{35} = \frac{(b_{32}m_{22} + b_{35}m_{52})(b_{22}m_{25} + b_{25}m_{55}) + (b_{32}m_{25} + b_{35}m_{55})(1 - b_{22}m_{22} - b_{25}m_{52})}{(1 - b_{22}m_{22} - b_{25}m_{52})(1 - b_{52}m_{25} - b_{55}m_{55}) - (b_{52}m_{22} + b_{55}m_{52})(b_{22}m_{25} + b_{25}m_{55})},$$

$$\delta_{42} = \frac{(b_{42}m_{22} + b_{45}m_{52})(1 - b_{52}m_{25} - b_{55}m_{55}) + (b_{42}m_{25} + b_{45}m_{55})(b_{52}m_{22} + b_{55}m_{52})}{(1 - b_{22}m_{22} - b_{25}m_{52})(1 - b_{52}m_{25} - b_{55}m_{55}) - (b_{52}m_{22} + b_{55}m_{52})(b_{22}m_{25} + b_{25}m_{55})},$$

$$\delta_{45} = \frac{(b_{42}m_{22} + b_{45}m_{52})(b_{22}m_{25} + b_{25}m_{55}) + (b_{42}m_{25} + b_{45}m_{55})(1 - b_{22}m_{22} - b_{25}m_{52})}{(1 - b_{22}m_{22} - b_{25}m_{52})(1 - b_{52}m_{25} - b_{55}m_{55}) - (b_{52}m_{22} + b_{55}m_{52})(b_{22}m_{25} + b_{25}m_{55})},$$

$$\delta_{52} = \frac{b_{52}m_{22} + b_{55}m_{52}}{(1 - b_{22}m_{22} - b_{25}m_{52})(1 - b_{52}m_{25} - b_{55}m_{55}) - (b_{52}m_{22} + b_{55}m_{52})(b_{22}m_{25} + b_{25}m_{55})},$$

$$\delta_{55} = \frac{1 - b_{22}m_{22} - b_{25}m_{52}}{(1 - b_{22}m_{22} - b_{25}m_{52})(1 - b_{52}m_{25} - b_{55}m_{55}) - (b_{52}m_{22} + b_{55}m_{52})(b_{22}m_{25} + b_{25}m_{55})},$$

$$\delta_{62} = \frac{(b_{62}m_{22} + b_{65}m_{52})(1 - b_{52}m_{25} - b_{55}m_{55}) + (b_{62}m_{25} + b_{65}m_{55})(b_{52}m_{22} + b_{55}m_{52})}{(1 - b_{22}m_{22} - b_{25}m_{52})(1 - b_{52}m_{25} - b_{55}m_{55}) - (b_{52}m_{22} + b_{55}m_{52})(b_{22}m_{25} + b_{25}m_{55})},$$

$$\delta_{65} = \frac{(b_{62}m_{22} + b_{65}m_{52})(b_{22}m_{25} + b_{25}m_{55}) + (b_{62}m_{25} + b_{65}m_{55})(1 - b_{22}m_{22} - b_{25}m_{52})}{(1 - b_{22}m_{22} - b_{25}m_{52})(1 - b_{52}m_{25} - b_{55}m_{55}) - (b_{52}m_{22} + b_{55}m_{52})(b_{22}m_{25} + b_{25}m_{55})}.$$

Os outros blocos de (A.0.7), ficam:

$$-\Delta \bar{\mathbf{M}}_{10} = \begin{pmatrix} 0 & -(b_{12} + \delta_{12}b_{22} + \delta_{15}b_{52}) & 0 & 0 & -(b_{15} + \delta_{12}b_{25} + \delta_{15}b_{55}) & 0 \\ 0 & -(\delta_{22}b_{22} + \delta_{25}b_{52}) & 0 & 0 & -(\delta_{22}b_{25} + \delta_{25}b_{55}) & 0 \\ 0 & -(\delta_{32}b_{22} + b_{32} + \delta_{35}b_{52}) & 0 & 0 & -(\delta_{32}b_{25} + b_{35} + \delta_{35}b_{55}) & 0 \\ 0 & -(\delta_{42}b_{22} + b_{42} + \delta_{45}b_{52}) & 0 & 0 & -(\delta_{42}b_{25} + b_{45} + \delta_{45}b_{55}) & 0 \\ 0 & -(\delta_{52}b_{22} + \delta_{55}b_{52}) & 0 & 0 & -(\delta_{52}b_{25} + \delta_{55}b_{55}) & 0 \\ 0 & -(\delta_{62}b_{22} + \delta_{65}b_{52} + b_{62}) & 0 & 0 & -(\delta_{62}b_{25} + \delta_{65}b_{55} + b_{65}) & 0 \end{pmatrix}, \quad (\text{A.0.15})$$

$$-\bar{\mathbf{M}}_{01}\Delta = \begin{pmatrix} 0 & -(m_{12}\delta_{22} + m_{15}\delta_{52}) & 0 & 0 & -(m_{12}\delta_{25} + m_{15}\delta_{55}) & 0 \\ 0 & -(m_{22}\delta_{22} + m_{25}\delta_{52}) & 0 & 0 & -(m_{22}\delta_{25} + m_{25}\delta_{55}) & 0 \\ 0 & -(m_{32}\delta_{22} + m_{35}\delta_{52}) & 0 & 0 & -(m_{32}\delta_{25} + m_{35}\delta_{55}) & 0 \\ 0 & -(m_{42}\delta_{22} + m_{45}\delta_{52}) & 0 & 0 & -(m_{42}\delta_{25} + m_{45}\delta_{55}) & 0 \\ 0 & -(m_{52}\delta_{22} + m_{55}\delta_{52}) & 0 & 0 & -(m_{52}\delta_{25} + m_{55}\delta_{55}) & 0 \\ 0 & -(m_{62}\delta_{22} + m_{65}\delta_{52}) & 0 & 0 & -(m_{62}\delta_{25} + m_{65}\delta_{55}) & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{A.0.16})$$

e também,

$$\mathbf{1} + \bar{\mathbf{M}}_{01}\Delta\bar{\mathbf{M}}_{10} = \begin{pmatrix} 1 & \alpha_{12} & 0 & 0 & \alpha_{15} & 0 \\ 0 & \alpha_{22} & 0 & 0 & \alpha_{25} & 0 \\ 0 & \alpha_{32} & 1 & 0 & \alpha_{35} & 0 \\ 0 & \alpha_{42} & 0 & 1 & \alpha_{45} & 0 \\ 0 & \alpha_{52} & 0 & 0 & \alpha_{55} & 0 \\ 0 & \alpha_{62} & 0 & 0 & \alpha_{65} & 1 \end{pmatrix}, \quad (\text{A.0.17})$$

onde definimos

$$\alpha_{12} = m_{12}(\delta_{22}b_{22} + \delta_{25}b_{52}) + m_{15}(\delta_{52}b_{22} + \delta_{55}b_{52}), \quad (\text{A.0.18})$$

$$\alpha_{15} = m_{12}(\delta_{22}b_{25} + \delta_{25}b_{55}) + m_{15}(\delta_{52}b_{25} + \delta_{55}b_{55}), \quad (\text{A.0.19})$$

$$\alpha_{22} = m_{22}(\delta_{22}b_{22} + \delta_{25}b_{52}) + m_{25}(\delta_{52}b_{22} + \delta_{55}b_{52}), \quad (\text{A.0.20})$$

$$\alpha_{25} = m_{22}(\delta_{22}b_{25} + \delta_{25}b_{55}) + m_{25}(\delta_{52}b_{25} + \delta_{55}b_{55}), \quad (\text{A.0.21})$$

$$\alpha_{32} = m_{32}(\delta_{22}b_{22} + \delta_{25}b_{52}) + m_{35}(\delta_{52}b_{22} + \delta_{55}b_{52}), \quad (\text{A.0.22})$$

$$\alpha_{35} = m_{32}(\delta_{22}b_{25} + \delta_{25}b_{55}) + m_{35}(\delta_{52}b_{25} + \delta_{55}b_{55}), \quad (\text{A.0.23})$$

$$\alpha_{42} = m_{42}(\delta_{22}b_{22} + \delta_{25}b_{52}) + m_{45}(\delta_{52}b_{22} + \delta_{55}b_{52}), \quad (\text{A.0.24})$$

$$\alpha_{45} = m_{42}(\delta_{22}b_{25} + \delta_{25}b_{55}) + m_{45}(\delta_{52}b_{25} + \delta_{55}b_{55}), \quad (\text{A.0.25})$$

$$\alpha_{52} = m_{52}(\delta_{22}b_{22} + \delta_{25}b_{52}) + m_{55}(\delta_{52}b_{22} + \delta_{55}b_{52}), \quad (\text{A.0.26})$$

$$\alpha_{55} = 1 + m_{52}(\delta_{22}b_{25} + \delta_{25}b_{55}) + m_{55}(\delta_{52}b_{25} + \delta_{55}b_{55}), \quad (\text{A.0.27})$$

$$\alpha_{62} = m_{62}(\delta_{22}b_{22} + \delta_{25}b_{52}) + m_{65}(\delta_{52}b_{22} + \delta_{55}b_{52}), \quad (\text{A.0.28})$$

$$\alpha_{65} = m_{62}(\delta_{22}b_{25} + \delta_{25}b_{55}) + m_{65}(\delta_{52}b_{25} + \delta_{55}b_{55}). \quad (\text{A.0.29})$$

Obtemos, pela fórmula de Bolz-Banachiewicz (A.0.7), todos elementos dos blocos da matriz M .