

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

Leandro de Castro Guarnieri

**Transporte Eletrônico Quântico em uma Heteroestrutura de
Dupla Barreira (HDB) assistido por Fônons**

Juiz de Fora
agosto, 2011

Leandro de Castro Guarnieri

Transporte Eletrônico Quântico em uma Heteroestrutura de Dupla Barreira (HDB) assistido por Fônons

Tese de doutorado 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. Virgílio de Carvalho dos Anjos

Co-orientador: Prof. Dr. Sergio Saul Makler

Juiz de Fora

agosto, 2011

Guarnieri, Leandro de Castro

Transporte Eletrônico Quântico em uma Heteroestrutura de Dupla Barreira (HDB) assistido por Fônons/ Leandro de Castro Guarnieri. -Juiz de Fora, 2011.

119 f.: il.

INSTITUTO DE CIÊNCIAS EXATAS

PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA

Tese (Doutorado em Física) - Universidade Federal de Juiz de Fora, Instituto de Ciências Exatas. Programa de Pós-Graduação em Física.

1. Saser 2. HDB 3. Funções de Green 4. Interação elétron-fônon 5. Equações Cinéticas

CDU 53

Leandro de Castro Guarnieri

Transporte Eletrônico Quântico em uma Heteroestrutura de Dupla Barreira (HDB) assistido por Fônons

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

Aprovada em – de agosto de 2011

Prof. Dr. Virgílio de Carvalho dos Anjos
Orientador (UFJF)

Prof. Dr. Sergio Saul Makler
Co-orientador (UFJF)

Prof. Dr. Ivan da Cunha Lima (UERJ)

Prof. Dr. José Carlos Egues (IFSC -USP)

Prof. Dr. José Maria Villas Boas (UFU)

Dedico à minha família por todo o apoio e carinho. Aos meus pais Paulo e Sônia que são o alicerce da minha vida. Aos meus irmãos Felipe e Ana Paula que são pessoas maravilhosas. Ao meu amor Franciane.

AGRADECIMENTOS

A **Deus** pela sua presença em todos os momentos difíceis e alegres na minha vida e por ter me ajudado em mais uma conquista.

Ao Prof. Virgílio pelos anos de convivência e os ensinamentos que influenciaram na minha formação científica.

Ao Prof. Sergio por sua participação efetiva na idealização e conclusão deste trabalho

A minha família.

Aos meus amigos.

Aos colegas de pós-graduação.

Aos professores e funcionários do departamento de Física.

À CAPES, CNPQ, FAPEMIG e UFJF que foram o suporte financeiro na realização e na divulgação deste trabalho.

RESUMO

Nesta tese, é feito um estudo teórico sobre as propriedades de transporte de elétrons e de emissão de um feixe coerente de fônons com frequências na faixa de terahertz, conhecido como saser, a partir de um dispositivo semiconductor de dimensões nano-métricas, formado por uma heteroestrutura de dupla barreira (HDB) e controlado por um potencial externo. O sistema é descrito por um hamiltoniano na aproximação de ‘tight-binding’ no qual são incluídos as contribuições dos elétrons, dos fônons e das interações elétron-fônon e elétron-elétron.

Para o estudo das propriedades de transporte eletrônico, utilizou-se do formalismo de Keldysh que considera, de forma direta, as interações de muitos corpos com a finalidade de reduzir uma corrente de elétrons fora do equilíbrio a uma que depende das funções Green retardadas que estão em equilíbrio termodinâmico a uma dada temperatura. Um procedimento conhecido como dizimação é empregado repetidamente ao longo deste trabalho para a obtenção das funções de Green retardadas.

Para o estudo das propriedades de emissão dos fônons TA, são utilizadas as soluções das equações cinéticas que governam as populações dos elétrons nos dois primeiros níveis ressonantes e dos fônons dentro do poço. O perfil de energia potencial e a distribuição de cargas são calculados auto-consistentemente através de um sistema de equações no qual se inclui a equação de Poisson.

Verificaram-se nos resultados as conhecidas regiões de instabilidade no início da emissão dos fônons LO e de biestabilidade no final do segundo pico da corrente. Uma análise sobre o comportamento destas regiões é feita através de mudanças nos parâmetros da HDB. A influência da temperatura sobre o saser também é estudada. A baixa temperatura, os resultados encontrados aqui coincidem com aqueles existentes na literatura.

ABSTRACT

In this thesis, we study theoretically the transport properties of electrons and emission of a coherent beam of TA phonons with terahertz frequencies, known as saser, from a semiconductor device of nanometric dimensions formed by a double barrier heterostructure and controlled by an external potential. The system is described by a Hamiltonian in the ‘tight-binding’ approximation in which the electrons, the phonons, the electron-phonon and the electron-electron interactions contributions are included.

To study the electronic transport properties we use the Keldysh formalism, which directly considers the many body’s interactions, to reduce the flow of electrons out of equilibrium to one that depends on the retarded Green functions that are in the thermodynamic equilibrium at a given temperature. A procedure known as decimation is used repeatedly throughout this work to find such retarded Green functions.

To study the emission properties of the TA phonons, we solve the kinetic equations that govern the populations of electrons in the first two resonant levels and the phonons in the well. The potential profile and the charge distribution energy are calculated self-consistently, through a system of equations which includes the Poisson equation.

We verify in our results the well known regions of instability at the beginning LO phonon emission and bistability at the end of the second peak current. We analyze the behavior of these regions through the change in the barriers thickness of the HDB. A study of the influence of temperature on saser is carried out in this work. At low temperatures, our results coincide with those in the literature.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1.1 Resultados de Goldman <i>et. al.</i> mostrando a curva característica proveniente da interação elétron-fônon.	16
Figura 1.2 Representação espacial da amostra.	18
Figura 1.3 Perfil do dispositivo perto da condição de ressonância.	19
Figura 2.1 Perfil da base da banda de condução em relação às camadas j	23
Figura 2.2 Diagrama da corrente que passa pelo plano j	25
Figura 2.3 Representação da corrente média $\langle I \rangle$ entre os planos $j - 1$ e j	26
Figura 3.1 Diagramas de Feynman.	31
Figura 3.2 a) Diagrama Desconectado b) Diagrama Conectado.	31
Figura 3.3 Diagramas de Feynman para processos de dois fônons	34
Figura 3.4 Contorno C_l	38
Figura 3.5 Contorno C	39
Figura 3.6 Contorno C_v	41
Figura 3.7 Deformação do contorno C	43
Figura 4.1 Perfil do potencial da HDB em relação às camadas j	48
Figura 4.2 Representação de uma semicadeia.	50
Figura 4.3 Diagrama para o cálculo da função de Green de Superfície.	50
Figura 4.4 Perfil da região de dispersão.	53
Figura 4.5 Representação da reconexão da região de espalhamento com as semicadeias à direita e à es-	

querda.	54
Figura 4.6 Representação do sistema renormalizado.	56
Figura 4.7 Diagrama que representa o processo de reconexão.	58
Figura 4.8 Representação do perfil de potencial da HDB.	71
Figura 4.9 Corrente de elétrons em função do potencial aplicado a uma temperatura $T=25K$	72
Figura 4.10 Corrente proveniente do pico excitado para as temperaturas $T=0K, 5K$ e $25K$	73
Figura 5.1 Representação do cálculo da corrente.	79
Figura 5.2 Corrente total do sistema e as respectivas contribuições dos canais para uma HDB (20/70/20 camadas).	81
Figura 5.3 Variando o número de camadas N_d do poço.	82
Figura 5.4 Corrente total para uma HDB de 20/45/20 camadas.	83
Figura 5.5 Corrente total para uma HDB de 18/45/22 camadas.	84
Figura 7.1 As taxas e os números de elétrons e fônons TA calculados auto-consistentemente para uma dupla barreira de 20–70–20 camadas a $T \approx 0K$	92
Figura 7.2 O saser em uma HDB (20/70/11 camadas) para temperaturas $T=10K, 50K, 75K$ e $100K$	94
Figura 7.3 A intensidade do saser em função da potencial em uma HDB (20/70/11 camadas), considerando-se as mesmas temperaturas do gráfico da fig. (7.2).	95
Figura 7.4 A corrente de elétrons em função do potencial aplicado para as seguintes larguras de barreiras $N_b = 11, 12, 14$	96
Figura 7.5 Saser para as seguintes larguras de barreiras $N_b = 11, 12, 14$	97
Figura 7.6 A corrente $\tilde{I}(U)$ características da HDB (20–70–21) a temperatura $0.1K$, quando aumentamos e diminuimos do campo externo, representados pelas setas de ida e de volta.	98
Figura B.1 Diagrama do cálculo das funções de Green na HDB com interação elétron-fônon.	103
Figura B.2 Canais independentes.	104

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	11
1.1	TRANSPORTE QUÂNTICO EM SISTEMAS NANOESTRUTURADOS	12
1.2	FÔNONS	14
1.3	TUNELAMENTO ASSISTIDO POR FÔNONS	15
1.4	EMISSÃO ESTIMULADA E COERENTE DE FÔNONS	16
1.5	O DISPOSITIVO	17
1.6	POSSÍVEIS APLICAÇÕES DO SASER	19
2	TRANSPORTE ELETRÔNICO EM UMA HETEROESTRUTURA DE DUPLA BARREIRA	22
2.1	O HAMILTONIANO DOS ELÉTRONS	22
2.1.1	Corrente eletrônica no formalismo de ligações fortes em uma dimensão	24
3	INTRODUÇÃO ÀS FUNÇÕES DE GREEN	27
3.1	FUNÇÕES DE GREEN A TEMPERATURA ZERO	27
3.1.1	Teorema de Wick	29
3.1.2	Diagramas de Feynman	31
3.1.3	Polarização do Vácuo	32
3.1.4	Equação de Dyson	32
3.2	FUNÇÕES DE GREEN A TEMPERATURA FINITA	34
3.3	FUNÇÕES DE GREEN FORA DO EQUILÍBRIO	37
3.3.1	Equação de Dyson fora do equilíbrio	41
3.3.2	Teorema de Langreth	43

3.3.3	Equação de Keldysh	45
4	FUNÇÕES DE GREEN PARA UM HAMILTONIANO DE HETEROESTRUTURAS SEMICONDUTORAS	48
4.1	CÁLCULO DAS FUNÇÕES DE GREEN	48
4.1.1	Função de Green de superfície	49
4.1.2	Dizimação da dupla barreira	52
4.2	CORRENTE UNIDIMENSIONAL DEPENDENTE DA TEMPERATURA . . .	57
4.3	RELAÇÃO DA FUNÇÃO DE GREEN COM A TRANSMITÂNCIA	63
4.4	CÁLCULO DA CORRENTE 3D	68
4.5	RESULTADOS	70
5	TRANSPORTE COM INTERAÇÃO ELÉTRON-FÔNON	74
5.1	INTRODUÇÃO	74
5.1.1	O Hamiltoniano de Fröhlich	75
5.2	TRANSPORTE ELETRÔNICO ASSISTIDO POR FÔNONS EM UMA HDB .	76
5.2.1	O hamiltoniano total do sistema	76
5.2.2	Cálculo da corrente	78
5.2.3	Resultados	81
6	EMISSÃO DOS FÔNONS E ACÚMULO DE CARGA NA HDB	85
6.1	EQUAÇÕES CINÉTICAS	85
6.2	EFEITOS DA ACUMULAÇÃO DE CARGA	88
7	RESULTADOS E CONCLUSÕES	91
7.1	RESULTADOS FINAIS	91
7.2	CONCLUSÕES FINAIS	99
7.3	TRABALHOS PUBLICADOS	99
7.4	CONGRESSOS	100

APÊNDICE A – INTEGRAL DA CORRENTE TOTAL	101
APÊNDICE B – FUNÇÃO DE GREEN NA HDB COM INTERAÇÃO ELÉTRON- FÔNON	103
REFERÊNCIAS	114

1 INTRODUÇÃO

Neste capítulo será feita uma descrição sucinta dos processos de funcionamento e dos efeitos mais importantes que estão envolvidos no dispositivo proposto nesta tese, assim como uma breve resenha histórica e propostas de possíveis aplicações.

Em 1916, Albert Einstein lançou os fundamentos teóricos que serviram de base à invenção do laser, a partir dos processos de emissão e absorção estimulada de radiação. Esta teoria ficou esquecida até o final da Segunda Guerra Mundial. No ano de 1953, Charles Hard Townes, James P. Gordon e Herbert J. Zeiger construíram um dispositivo, similar ao laser, capaz de amplificar a radiação por emissão estimulada na faixa de frequências de microondas, conhecido como MASER (*Microwaves Amplification by Stimulated Emission of Radiation*). E em 1960, T. Mainman criou o primeiro dispositivo com emissão eletromagnética monocromática (frequência muito bem definida), colimada (propaga-se como um feixe) e coerente (possui fase bem definida) na faixa do visível conhecido como laser (*Light Amplification by Stimulated Emission of Radiation*) de rubi.

Na década de 60, Haken estudou teoricamente, pela primeira vez, processos de emissão estimulada de fônons [1].

No início da década de 90 foi proposto teoricamente um dispositivo capaz de gerar fônons coerentes na faixa de ultra-alta-frequências (terahertz) [2] conhecido como saser (*Sound Amplification by Stimulated Emission of Radiation*) que é análogo ao laser. Um fônon é uma quasipartícula¹ caracterizada pela quantização dos modos vibracionais de uma rede cristalina.

O saser estudado nesta tese consiste em um feixe coerente de fônons transversais acústicos (TA) de ultra-alta-frequência que surgem do decaimento de fônons longitudinais ópticos (LO₀) do GaAs. Estes fônons LO₀ são gerados pelo decaimento de elétrons que são injetados no primeiro nível excitado de um sistema de heteroestrutura de dupla barreira (HDB). Para que ocorra a sintonização desse dispositivo, um potencial externo é aplicado de tal forma que a

¹Excitação de um sistema de muitos corpos que se comporta como uma partícula, mas que não existe como partícula livre.

diferença entre o primeiro nível excitado e o nível fundamental fique próxima à energia correspondente aos fônons LO_0 .

As próximas seções deste capítulo explicam em detalhes o funcionamento do saser, os processos físicos que lá ocorrem, as possíveis aplicações futuras e o desenvolvimento atual desta tecnologia.

1.1 TRANSPORTE QUÂNTICO EM SISTEMAS NANOESTRUTURADOS

A crescente necessidade de miniaturização de dispositivos para o uso em circuitos digitais de computadores modernos implica em uma intensa pesquisa no campo de sistemas com dimensões nanométricas. Novas abordagens teóricas aparecem concomitantemente ao surgimento de tecnologias capazes de produzir sistemas de dimensões que variam de 5nm a 500nm. Estruturas nanométricas permitem estudos dos níveis de energia dos poços quânticos através do tunelamento quântico, que são de interesse em física da matéria condensada. Neste contexto estão as HDB em face às suas potenciais aplicações como osciladores eletrônicos de ultra-alta-frequência, diodos, transistores e outros dispositivos eletrônicos [3]. A corrente de elétrons na entrada ou na saída do dispositivo (dupla barreira), como função do potencial de polarização U , possui características fortemente não lineares que estão diretamente associadas ao confinamento quântico dos elétrons no poço de potencial formado entre as duas barreiras [4]. Deste modo, podem aparecer regiões com soluções biestáveis, multiestáveis [5], quase periódicas, críticas ou mesmo caóticas.

Desde o trabalho pioneiro de Chang, Esaki e Tsu [4], vários estudos vem sendo realizados tanto na área de transporte em HDB, compostas por AlGaAs-GaAs, quanto no entendimento das suas propriedades. O conceito de tunelamento através de uma barreira de potencial é proveniente do campo da mecânica quântica e sua observação experimental é uma manifestação do comportamento ondulatório da matéria.

Um dos problemas mais importantes no estudo do tunelamento em HDB é a interação elétron-fônon. Somente depois dos trabalhos de Goldman, Tsui e Cunningham [6] ficou evidente a necessidade e a importância de se levar em conta tal interação nos estudos das propriedades eletrônicas dos dispositivos baseados em HDB.

As observações experimentais e os estudos teóricos de fenômenos como biestabilidade intrínseca [7] e tunelamento ressonante assistido por fônons [6] em HDB fornecem possibilidades amplas para projetos de dispositivos eletrônicos, ópticos e acústicos bem como suas aplicações.

A maior parte do conhecimento sobre transporte eletrônico em sólidos é baseado em conceitos semiclássicos que veem os elétrons como partículas que obedecem às leis newtonianas da mecânica, ocasionalmente espalhadas por fônons ou impurezas ao aplicar-se um campo externo no meio.

Os efeitos quânticos são inevitáveis em dispositivos com dimensões menores do que 100 nanômetros, conhecidos como nanoestruturados. A física desses dispositivos quânticos [3] é completamente diferente da física clássica e novos aspectos tornam-se importantes na análise, tais como a quantização dos níveis de energia e a coerência de fase das ondas de partículas, entre outras. Em uma HDB o movimento dos elétrons é quase-quantizado na direção perpendicular às camadas (ou interfaces) crescidas em um substrato. As mudanças de materiais entre as camadas fornecem barreiras de energias que limitam e vinculam o movimento dos elétrons em regiões do espaço recíproco, de tal forma, que gases quase-bidimensionais de elétrons são formados [8]. Os dispositivos nanoestruturados podem ser construídos usando tecnologias nanolitográficas, ou de crescimento epitaxial tais como MBE (*Molecular Beam Epitaxy*) ou MOVCD (*Metal Organic Chemical Vapour Deposition*).

Existem alguns formalismos para o estudo do transporte quântico em sistemas nanoestruturados, dentre eles, estão o de Landauer-Büttiker [9, 10] e o de Keldysh [11]. O primeiro expressa a condutância em função da probabilidade de transmissão dos modos que se propagam perto do nível de Fermi:

$$I = gV, \quad (1.1.1)$$

em que I é a corrente, V é o potencial aplicado e g é a condutância,

$$g = \frac{e^2}{h} T, \quad (1.1.2)$$

que é proporcional à transmitância. Contudo essas fórmulas não podem ser utilizadas para o transporte eletrônico do dispositivo aqui estudado, pois as mesmas somente são válidas para potenciais externos pequenos, o que não ocorre no funcionamento do saser. Para solucionar tal problema, serão utilizadas as funções de Green de não-equilíbrio.

A vantagem do formalismo das funções de Green fora do equilíbrio, em relação à abordagem Landauer-Büttiker, está na definições de conceitos físicos que englobam sistemas em e fora equilíbrio, além da inclusão, de forma realística, das interações de muitos corpos como elétron-elétron e elétron-fônon [12].

O formalismo de funções de Green fora do equilíbrio foi desenvolvido originalmente pelo

físico russo Keldysh [11] em 1965 e independentemente por Kadanoff e Baym [13]. Porém, somente na década de 90, com a necessidade de se explicarem alguns experimentos, é que essa técnica começou a ser empregada para calcular propriedades de transporte (e.g., corrente, ruído) em sistemas nanoscópicos. Vale citar o trabalho pioneiro de Anda e Flores [12], no qual os autores apresentaram uma equação para corrente em um sistema constituído por dois terminais acoplados a uma região central, que pode ser, por exemplo, um ponto ou um poço quântico. Posteriormente, surgiram outros trabalhos [14, 15] que sistematizaram a forma de se calcular a corrente e aplicaram suas equações no tratamento de perturbações independentes e dependentes do tempo, desde que o hamiltoniano do sistema seja dado. Após estes trabalhos, as funções de Green de não-equilíbrio vêm sendo aplicadas aos estudos de transportes através de sistemas nanoestruturados em diversos regimes.

1.2 FÔNONS

Um sólido é constituído por um grande número de átomos ligados forças de coesão de vários tipos. Diferentemente do que ocorre num gás, em que as moléculas estão livres para percorrer todo o recipiente, ou num líquido, em que as moléculas têm menos liberdade mas ainda podem percorrer grandes distâncias, num sólido, o movimento dos átomos se torna bastante restrito. Cada átomo se movimenta apenas dentro de uma pequena vizinhança, executando movimento vibratório em torno de seu um ponto de equilíbrio. Num sólido cristalino, os pontos de equilíbrio das vibrações atômicas formam uma estrutura espacial regular como ocorre com o GaAs em que os íons de gálio e de arsênico podem formar uma estrutura cristalina do tipo Zinc-Blend.

A interação entre os átomos permite a propagação de ondas elásticas no meio sólido que podem ser tanto transversais quanto longitudinais. Se as oscilações dos átomos ao redor das posições de equilíbrio são pequenas, o que deve ocorrer a baixas temperaturas, a energia potencial de interação poderá ser aproximada por uma forma quadrática dos deslocamentos dos átomos de suas posições de equilíbrio. Um sólido cristalino cujos átomos interagem de acordo com tal potencial é denominado sólido harmônico. Num sólido harmônico as ondas elásticas são harmônicas e constituem os modos normais de vibração do sólido cristalino. A ausência de termos anarmônicos no potencial evita que as ondas elásticas interajam entre si. Um sólido harmônico é descrito classicamente por meio da hamiltoniana:

$$H = \sum_s H_s \quad (1.2.1)$$

$$H_s = \left[\frac{1}{2m} P_s^2 + \frac{1}{2} m \omega_s^2 Q_s^2 \right] \quad (1.2.2)$$

em que Q_s denota os componentes cartesianos de cada um dos coeficientes reais da expansão de Fourier dos deslocamentos dos átomos de suas posições de equilíbrio e está associado a um dos modos normais de vibração do sólido cristalino. A grandeza P_s é o momento canonicamente conjugado à variável Q_s . O índice $s = (k, \alpha)$ denota conjuntamente os possíveis vetores de onda k assim como os modos de propagação das ondas, os modos transversais e os longitudinais, representados por α . Essa descrição mostra que um sólido harmônico pode ser imaginado como uma coleção de osciladores harmônicos unidimensionais, cada um com uma frequência própria de oscilação igual a ω_s . Cada oscilador representa a propagação de uma onda plana de vetor de onda k e modo de vibração α .

A quantização das ondas elásticas dão origem às excitações elementares denominadas fônons. Para isso introduzimos a descrição quântica pela substituição das variáveis dinâmicas Q_s e P_s pelos operadores \hat{Q}_s e \hat{P}_s que satisfazem a relação de comutação $[\hat{Q}_s, \hat{P}_s] = i\hbar$. Usando esse procedimento, a parcela H_s se converte numa hamiltoniana quântica cujos autovalores são dados por:

$$E = \hbar \omega_s \left(n_s + \frac{1}{2} \right), \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (1.2.3)$$

Feita a quantização interpretamos os modos normais descritos por H_s como partículas denominadas fônons e n_s torna-se o número de fônons com energia $\hbar \omega_s$. O estudo dos fônons é importante na física do estado sólido por facilitar a compreensão de muitas propriedades dos sólidos, como por exemplo o calor específico, a condução térmica, a condutividade elétrica e a propagação do som.

1.3 TUNELAMENTO ASSISTIDO POR FÔNONS

Durante a década de 80, foram reportadas várias observações do comportamento da curva característica corrente-voltagem em uma heteroestrutura de dupla barreira (HDB). Estas observações foram focalizadas no tunelamento elástico de elétrons do emissor aos estados ressonantes dentro do poço. Posteriormente, Goldman, Tsui e Cunningham [6] observaram e interpretaram os picos satélites na curva $I(V)$ como sendo provenientes do tunelamento inelástico de elétrons assistidos por fônons, veja figura (1.1). Este tipo de tunelamento é manifestado na curva de transmitância em função da energia como um alargamento das ressonâncias e diminuição da altura da probabilidade de transmissão. Em amostras nas quais são possíveis as eliminações dos efeitos de dispersões devidos às impurezas e às imperfeições das interfaces, a interação

elétron-fônon dominante é devida aos fônons longitudinais ópticos (LO_0). Esta interação abre novos canais para o fluxo de elétrons. Em semicondutores polares, como o arseneto de gálio (GaAs), os elétrons interagem com os fônons, formando os polarons². O tunelamento de elétrons através de uma HDB assistido por fônons tem sido amplamente estudado tanto teórica como experimentalmente [2, 16, 17, 18, 19].

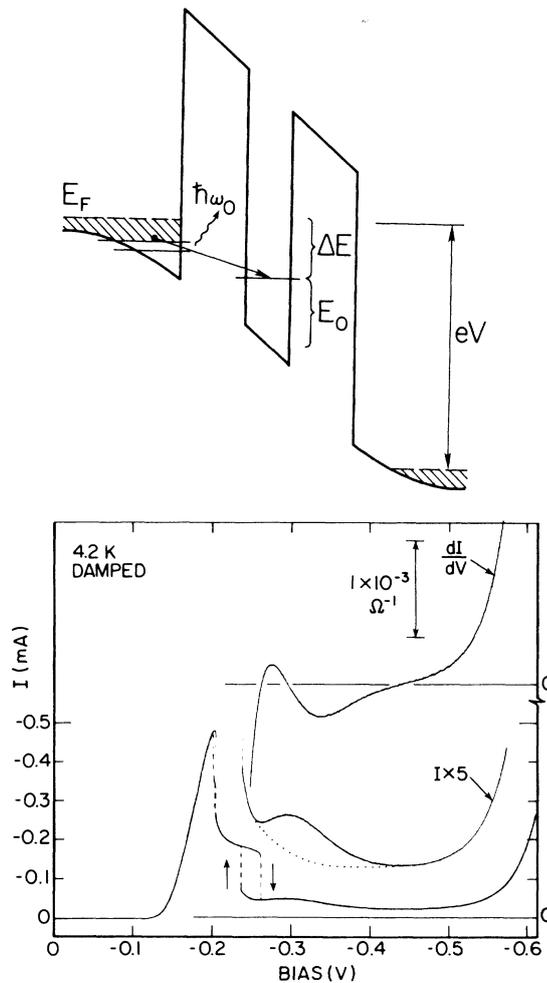


Figura 1.1: Resultados de Goldman *et. al.* mostrando a curva característica proveniente da interação elétron-fônon.

1.4 EMISSÃO ESTIMULADA E COERENTE DE FÔNONS

No começo da década de 60, a geração de fônons coerentes foi discutida por Tang [20] e obtida experimentalmente na mesma época por Tucker, Giordmaine e Kaiser [21, 22]. Estes

²Sistema formado pelo acoplamento do elétron com os íons da rede e que causa nesta uma deformação, quando um elétron é introduzido na banda de condução

fônons foram gerados por pulsos de laser intensos. Algumas aplicações e experimentos com fônons coerentes podem ser vistas em [22]. A geração de fônons pelo processo de emissão estimulada foi descrito primeiro teoricamente por Haken [1] e observada experimentalmente por Prieur et al [23, 24] que estudaram a emissão de fônons devido a transição entre o sistema de dois níveis bem conhecido em vidros. Os fônons gerados no referido processo têm uma distribuição de energias larga, em torno de $\varepsilon = 0,01meV$. Em outro trabalho relacionado a fônons coerentes de menor energia [25], fônons acústicos são gerados opticamente em uma super-rede, de modo que seus comprimentos de onda são os mesmos que o período espacial da super-rede (i.e. 500\AA). Para maiores detalhes sobre pulsos de fônons coerentes de frequência de THz, produzidos a partir de lasers pulsados em fento segundos, veja o artigo de revisão de Merlin [26] e as referências ali constantes.

Damen et al. [27] reportaram a geração de ondas acústicas monocromáticas de alta frequência via termomodulação induzida por laser. A frequência destes fônons varia na faixa entre 2 a 4 GHz. Zavtrak [28, 29, 30, 31, 32, 33] propôs um dispositivo formado por um líquido dielétrico com pequenas bolhas de gás, o qual funciona de maneira similar à um laser de elétrons livres. Este dispositivo pode produzir fônons acústicos coerentes por emissão estimulada a uma frequência $\omega \approx 2$ KHz.

Fokker et al [34, 35] reportam resultados experimentais de emissão de fônons em cavidades acústicas usando a separação Zeeman do dubleto metaestável em rubi.

Em 2002, Glavin *et. al.* [36, 37] previram teoricamente que a geração e amplificação de um feixe de fônons na frequência dos terahertz poderia ser alcançada a partir de um dispositivo eletrônico formado por uma super-rede de AlGaAs-GaAs, dopada por Si, no regime de saltos verticais dos elétrons entre poços vizinhos, os quais podem ser assistidos por fônons. Mais tarde, em 2006, Kent *et. al.* [38] constataram evidências experimentais de emissões estimuladas dos fônons na frequência de THz de tal dispositivo. O processo e o controle de geração deste dispositivo são similares ao dispositivo estudado nesta tese.

O dispositivo estudado aqui é um ressonador eletrônico de HDB o qual pode produzir um feixe contínuo de fônons coerentes com frequência na faixa dos 2 THz.

1.5 O DISPOSITIVO

O dispositivo estudado aqui é composto pelos semicondutores GaAs (A) e AlGaAs (B), os quais possuem a energias de ‘gap’ (energia da banda proibida) distintas, e quando juntos, forma-se uma barreira de potencial para os elétrons na banda de condução. Assim, intercalando

estes semicondutores de forma correta (A-B-A-B-A), ocorrerá a formação de uma dupla barreira de potencial conhecida como heteroestrutura de dupla barreira (HDB). A figura (1.2) mostra a representação espacial da disposição dos semicondutores para formação da HDB.

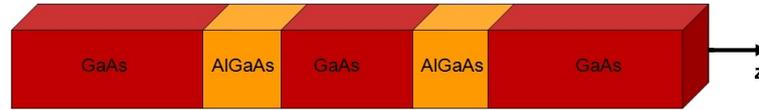


Figura 1.2: Representação espacial da amostra.

As dimensões consideradas na projeção deste dispositivo são tais que a diferença de energias ΔE entre o primeiro estado eletrônico excitado E_1 e o fundamental E_0 dentro do poço é da ordem da energia $\hbar\omega_0$ dos fônons longitudinais ópticos para pequenos valores do potencial aplicado, i.e., $\Delta E \leq \hbar\omega_0$, em que ω_0 é a frequência dos fônons LO_0 do GaAs no ponto Γ da zona de Brillouin. O nível de Fermi E_F^l no emissor é fixado de tal maneira que, à medida em que se aumenta o potencial externo U , os níveis no poço começam a descer em relação ao mesmo. O fluxo de elétrons começa quando o nível fundamental cai sob a energia de Fermi E_F^l e cessa, temporariamente, no momento em que E_0 passa por baixo do fundo da banda de condução do emissor (ϵ_0), até que o nível excitado E_1 alcance E_F^l . Contudo a diferença entre as energias ΔE aumenta proporcionalmente à medida que o potencial U aumenta, assim, para um dado valor de U em que $\epsilon_0 \leq E_1 \leq E_F^l$ e $\Delta E \approx \hbar\omega_0$ (condição de ressonância), ocorrerá um decaimento de elétrons do estado excitado para o fundamental com emissões de fônons LO_0 . Na figura (1.3), mostramos o perfil do potencial do dispositivo, assim como os dois primeiros níveis eletrônicos na condição de ressonância.

Para uma concentração de alumínio nas barreiras maior que 0.25 [39] ou 0.30 [40], os fônons gerados no processo descrito anteriormente estarão confinados dentro do poço podendo ser absorvidos, excitando assim os elétrons de E_0 para E_1 . Os fônons gerados dentro do poço possuem uma relação de dispersão bastante plana para o vetor de onda, logo a respectiva velocidade de grupo é bem pequena. Paralelamente a estes processos (emissão e absorção do fônon), ocorre o decaimento dos fônons LO_0 , com a geração de fônons longitudinais ópticos secundários (LO_1) e um feixe de fônons transversais acústicos (TA) que são coerentes [41]. Este feixe de fônons TA, o qual chamamos de feixe de saser, é gerado próximo ao ponto L da Zona de Brillouin e, conseqüentemente, emitido na direção [111]. Os fônons TA têm um tempo de vida longo [42] e um livre caminho médio $l \approx 2mm$ [43]. A convexidade da relação de dispersão do fônon TA impede o decaimento em outros fônons TA por não obedecerem à conservação de energia e *momentum* cristalino. O feixe de fônons TA produzido pelo mecanismo descrito anteriormente fará múltiplas reflexões entre as paredes internas da dupla barreira as quais fazem

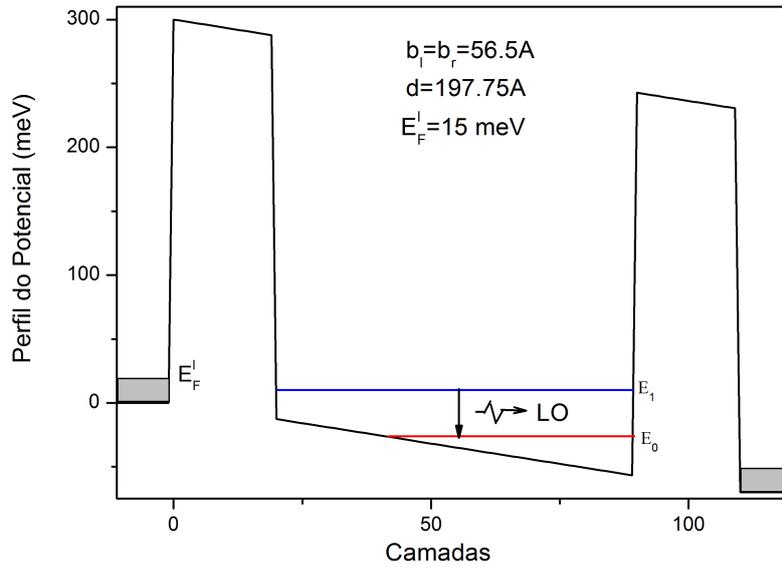


Figura 1.3: Perfil do dispositivo perto da condição de ressonância.

o papel de semi-espelhos. Com isso, ocorre a acumulação de um grande número de fônons TA com vetor de onda \mathbf{q} paralelo às interfaces. Para um determinado valor do potencial aplicado U_{th} , chamado de limiar, a probabilidade de que o sistema emita fônons TA com vetor de onda $\mathbf{q} = 0$ é maior que a soma das probabilidades de emissão nos outros modos com $\mathbf{q} \neq 0$. Devido a isso, para valores de potencial tais que $U > U_{th}$ o sistema se auto-organiza de maneira tal que os outros processos de emissão são escravizados, ou seja, são obrigados a emitir no modo selecionado pela cavidade ressonante (neste caso o modo no qual $\mathbf{q} = 0$). Dessa maneira obtém-se um feixe de fônons TA coerentes, num modo bem definido.

1.6 POSSÍVEIS APLICAÇÕES DO SASER

Um dos métodos mais conhecidos (e mais comuns) de se obterem imagens acústicas é o ultra-som médico [16]. Nesse método é explorado o fato de que diferentes conteúdos de água nos tecidos produzem diferentes atenuações do feixe (a frequência do feixe acústico utilizado na medicina é de aproximadamente 4MHz).

Comercialmente existem equipamentos para realizar microscopia acústica. Uma das técnicas mais usadas é a Microscopia Acústica de Varredura (*Scanning Acoustic Microscopy-SAM*), extensivamente analisada em [44]. Com essa técnica obtém-se resoluções da ordem de $0.4\mu\text{m}$,

com fônons de frequência igual a 2GHz.

Além da microscopia acústica de varredura existem outras técnicas de microscopia acústica apresentadas em [45]. Dentre elas temos: Microscopia Fotoacústica (*Photo Acoustic Microscopy-PAM*), Microscopia Acústica de Varredura Eletrônica (*Scanning Electron Acoustic Microscopy-SEAM*) e Microscopia Acústica de Varredura Laser (*Scanning Laser Acoustic Microscopy-SLAM*). No mesmo trabalho, apresenta-se uma revisão sobre a teoria de imagens acústicas assim como diagramas esquemáticos dos diferentes microscópios e as múltiplas aplicações industriais dos mesmos.

Sabendo-se que a resolução limite é inversamente proporcional ao comprimento de onda e que todos os equipamentos citados trabalham com comprimentos de ondas de três ordens de grandeza maior que do saser, temos assim que a resolução limite do feixe coerente de fônons TA será 1000 vezes maior que as dos feixes mencionados anteriormente.

H. Maris [46] descreve um método para fazer nanoscopia acústica por meio de ecos de pulsos ultra-curtos de fônons coerentes gerados opticamente. Tais fônons são detectados pela medição da variação da refletividade óptica devida à dispersão dos fônons. A frequência de tais feixes de fônons é da ordem de 2THz, similar ao dispositivo proposto aqui, porém não produzida via saser.

Os lasers não são ferramentas fundamentais para produção de imagens ópticas, contudo são úteis na obtenção das mesmas e, além disso, são indispensáveis na obtenção de hologramas. Por outro lado, muitos experimentos ópticos feitos com luz incoerente são realizados mais facilmente com ajuda de um laser. Devido a isso, muitos dos experimentos feitos hoje com fônons incoerentes poderiam ser feitos de uma maneira melhor com ajuda de um laser de fônons.

O feixe saser proposto nesta tese tem comprimentos de onda menores que 25\AA e é capaz de ‘ver’ detalhes de estruturas perto de 50nm, o que seria impossível com luz visível cujo comprimento de onda típico é de $\lambda \approx 500\text{nm}$. Por outro lado, se tentássemos ver estruturas em escalas submicrônicas, utilizando ondas eletromagnéticas (raio X) com o mesmo comprimento de onda do saser, fótons com energias maiores que 0.5KeV seriam empregados e estes poderiam afetar fortemente o sistema em estudo. Além disso o feixe de saser é mais penetrante que o de raio X. A energia típica de um fônons do saser, estudado aqui, é de $\hbar\omega_{TA} \approx 10\text{meV}$, seis ordens de grandeza menor que o raio X.

O dispositivo apresentado aqui poderia ser utilizado na obtenção de hologramas em escala nanométrica [17]. Para fazer isso, é necessário construir em GaAs um interferômetro acústico similar ao interferômetro de Michelson. O mesmo consiste em uma barreira fina de AlGaAs

que atuará como semi-espelho, localizada a 45° para separar o feixe em dois outros feixes de tal maneira que um deles passe através da amostra e o outro passe através de uma referência de GaAs puro. Depois disso, ‘espelhos’ (feitos de barreiras grossas de AlGaAs) podem ser utilizados para superpor os dois feixes e medir, com ajuda de um detector, o espectro de interferência. Esse espectro poderia ser analisado num computador para se obter um holograma tridimensional da nanoestrutura. No trabalho [16] são descritos um análogo acústico de um interferômetro de Sagnac.

Devido ao fato da amplitude do saser proposto aqui ser proporcional à corrente de alimentação, a amplitude do feixe de fônons pode ser modulada pela intensidade da corrente de entrada. Isso permitiria a utilização do feixe saser para enviar informação de um componente do circuito a outro em pequenas distâncias. Assim, estes dispositivos ‘fonoelétrônicos’ poderiam trabalhar com distâncias e energias menores do que aquelas que a optoeletrônica permite, melhorando assim o desempenho computacional.

Através do saser, poderiam-se manipular os elétrons dentro dos semicondutores de tal forma que as frequências em gigahertz dos processadores dos computadores, fabricados hoje em dia, passariam para terahertz [47].

Além disso, caso encontrássemos um material fonosensível (um composto com um modo mole próximo à frequência do laser de fônons) poderíamos utilizá-lo, junto com o nosso saser, em uma ‘nanolitografia’ que tornaria os processos de gravação mais eficientes em relação ao número de informações gravadas por área dos dispositivos, quando comparados aos métodos tradicionais, devido ao curto comprimento de onda e à baixa energia dos feixes de fônons. Assim, mais informações poderiam ser armazenadas em espaços menores.

Devido ao fato de o fônon ser sensível a todo tipo de defeitos da rede cristalina, o nosso saser poderia ser utilizado na obtenção de informações [46, 48] do interior da rede cristalina assim como na formação de imagens do mesmo [49].

As aplicações do saser descritas anteriormente poderão vir a ser inibidas por causa das limitações tecnológicas. As deformações, que ocorrem devido impurezas no crescimento das amostras, espalham os fônons TA e a temperaturas finitas surgem os ruídos de fundo provenientes dos fônons térmicos.

2 TRANSPORTE ELETRÔNICO EM UMA HETEROESTRUTURA DE DUPLA BARREIRA

2.1 O HAMILTONIANO DOS ELÉTRONS

Neste capítulo, o hamiltoniano que descreve os elétrons é apresentado e a relação para corrente em uma heteroestrutura de dupla barreira (HDB) fora do equilíbrio é calculada.

Para descrever os elétrons, será utilizado o formalismo de ligações fortes com parâmetro de saltos (“hoppings”) v entre primeiros vizinhos que são representados por $\langle \mathbf{r}, \mathbf{r}' \rangle$. Na base de Wannier [50] o hamiltoniano eletrônico pode ser escrito em termos dos operadores de criação $c_{\mathbf{r}}^{\dagger}$ e aniquilação $c_{\mathbf{r}}$ no sítio \mathbf{r} como

$$\hat{H}_e = \sum_{\mathbf{r}} \varepsilon_{\mathbf{r}} c_{\mathbf{r}}^{\dagger} c_{\mathbf{r}} + v \sum_{\langle \mathbf{r}, \mathbf{r}' \rangle} \left(c_{\mathbf{r}}^{\dagger} c_{\mathbf{r}'} + c_{\mathbf{r}'}^{\dagger} c_{\mathbf{r}} \right), \quad (2.1.1)$$

em que o ‘hopping’ v é escolhido sendo:

$$v = -\frac{\hbar^2}{2m^* a^2},$$

no qual m^* é a massa efetiva experimental. O parâmetro a é distância entre as camadas (igual à metade do parâmetro de rede do GaAs crescendo na direção [001]) e $\varepsilon_{\mathbf{r}}$ é a energia do elétron no sítio \mathbf{r} . Supondo-se que a estrutura cristalina seja cúbica simples, $\mathbf{r} \equiv (ma, na, ja)$ onde $m, n, j = -\infty, \dots, -1, 0, 1, \dots, \infty$. Levando-se em conta que o sistema não tem comportamento magnético, o subíndice σ , correspondente ao spin, foi deixado implícito.

Como o sistema tem simetria translacional nas direções (x, y) , perpendiculares à direção de crescimento (ou direção longitudinal) z , o hamiltoniano eletrônico pode ser desacoplado, expandindo-se os operadores $c_{\mathbf{r}}$ em ondas planas nestas direções:

$$c_{\mathbf{r}} = \sum_{\mathbf{k}} c_{j, \mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{x}_{m,n}}, \quad (2.1.2)$$

em que $\mathbf{x}_{m,n} = (ma, na)$.

Deste modo podemos tratar o sistema como a soma sobre hamiltonianos 1d com vetor de onda \mathbf{k} perpendicular à direção da corrente (z):

$$\hat{H}_e = \sum_{\mathbf{k}} \hat{H}'_e(\mathbf{k}), \quad (2.1.3)$$

$$\hat{H}'_e(\mathbf{k}) = \sum_j \left[\varepsilon_{j,\mathbf{k}} c_{j,\mathbf{k}}^\dagger c_{j,\mathbf{k}} + v \left(c_{j,\mathbf{k}}^\dagger c_{j+1,\mathbf{k}} + c_{j,\mathbf{k}}^\dagger c_{j-1,\mathbf{k}} \right) \right], \quad (2.1.4)$$

em que $\varepsilon_{j,\mathbf{k}} = E_{\mathbf{k}} + \varepsilon'_j$. A energia $E_{\mathbf{k}}$ do elétron no plano j com vetor de onda \mathbf{k} (contribuição na direção x e y) pode ser escrita como $E_{\mathbf{k}} = 2v(\cos(k_x a) + \cos(k_y a) - 2)$. A contribuição longitudinal para a energia $\varepsilon_{j,\mathbf{k}}$ é dada por: $\varepsilon'_j = \varepsilon_j - 2v$, em que 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 HDB. Assim, para $j < 0$, tem-se $\varepsilon_j = 0$ e para $j \geq N$, tem-se $\varepsilon_j = -U$. Por conveniência e comodidade, os

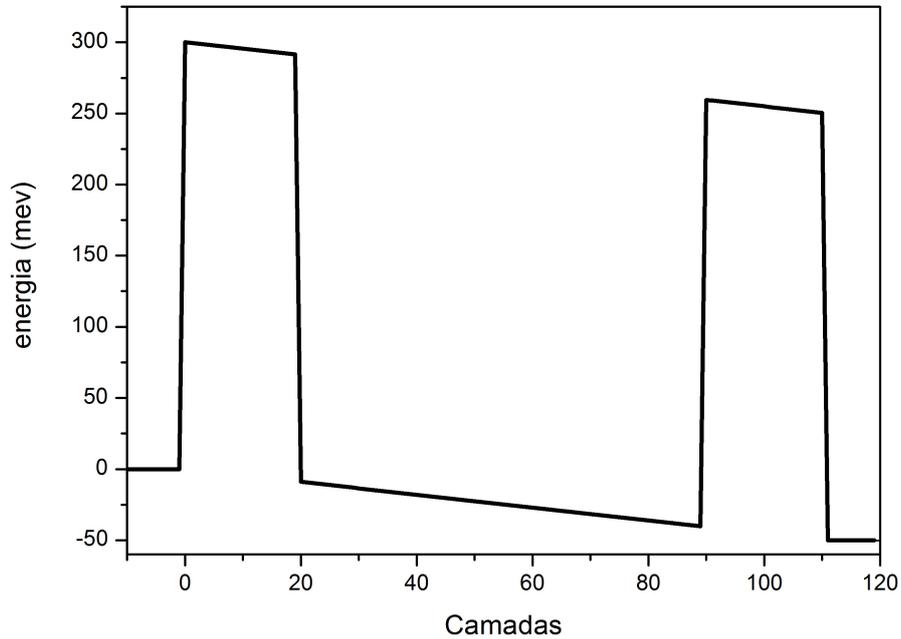


Figura 2.1: Perfil da base da banda de condução em relação às camadas j .

subíndices e o somatório em \mathbf{k} são mantidos implícitos até o cálculo da corrente tridimensional.

Os termos

$$E_{\mathbf{k}} \sum_j c_{j,\mathbf{k}}^\dagger c_{j,\mathbf{k}}$$

são constantes na diagonal da representação matricial e podem ser incluídos no final do processo. Dessa forma, o hamiltoniano dos elétrons que estão sendo tratados são dados por:

$$\hat{H}_e = \sum_j \left[\epsilon'_j c_j^\dagger c_j + v \left(c_j^\dagger c_{j+1} + c_j^\dagger c_{j-1} \right) \right]. \quad (2.1.5)$$

2.1.1 Corrente eletrônica no formalismo de ligações fortes em uma dimensão

O número de elétrons no sítio j é dado por:

$$N_j = c_j^\dagger c_j, \quad (2.1.6)$$

e a carga no sítio j é dada por:

$$q_j = eN_j. \quad (2.1.7)$$

A equação de movimento para um operador \hat{A} na representação de Heisenberg é dada por:

$$i\hbar \frac{d\hat{A}}{dt} = [\hat{A}, \hat{H}]. \quad (2.1.8)$$

O hamiltoniano do sistema é dado por:

$$\hat{H} = \hat{H}_e + \hat{H}_f + \hat{H}_{e-f} \quad (2.1.9)$$

em que \hat{H}_f é o hamiltoniano dos fônons e \hat{H}_{e-f} é o hamiltoniano de interação elétron-fônon, os quais serão vistos com maiores detalhes no capítulo 5. Fora da região da dupla barreira, em $j < 0$ ou $j \geq N$, temos que: $[N_j, H] = [N_j, H_e]$, pois $[N_j, H_f] = 0$ e $[N_j, H_{e-f}] = 0$. Assim a corrente nestas regiões é dada por,

$$i\hbar \frac{dq_j}{dt} = e \left[c_j^\dagger \left(i\hbar \frac{dc_j}{dt} \right) + \left(i\hbar \frac{dc_j^\dagger}{dt} \right) c_j \right], \quad (2.1.10)$$

e a equação de movimento do operador de aniquilação é dada por:

$$i\hbar \frac{dc_j}{dt} = c_j \hat{H}_e - \hat{H}_e c_j. \quad (2.1.11)$$

Utilizando-se das relações de anticomutação para os elétrons,

$$\begin{aligned} \{c_j^\dagger, c_{j'}\} &= \delta_{j,j'}, \\ \{c_j, c_{j'}\} &= 0, \\ \{c_j^\dagger, c_{j'}^\dagger\} &= 0, \end{aligned} \quad (2.1.12)$$

encontra-se:

$$i\hbar \frac{dc_j}{dt} = \epsilon'_j c_j + v(c_{j-1} + c_{j+1}), \quad (2.1.13)$$

e conjugando-se a eq. (2.1.13):

$$-i\hbar \frac{dc_j^\dagger}{dt} = \epsilon'_j c_j^\dagger + v(c_{j-1}^\dagger + c_{j+1}^\dagger). \quad (2.1.14)$$

Substituindo-se as relações (2.1.13) e (2.1.14) na equação (2.1.10), obtém-se:

$$\frac{i\hbar}{e} \frac{dq_j}{dt} = v \left[(c_j^\dagger c_{j-1} - c_{j-1}^\dagger c_j) - (c_{j+1}^\dagger c_j - c_j^\dagger c_{j+1}) \right], \quad (2.1.15)$$

sendo que esta relação pode se escrita como:

$$\frac{dq_j}{dt} = I_{j-1/2} - I_{j+1/2}, \quad (2.1.16)$$

em que

$$I_{j-1/2} = \frac{ev}{i\hbar} (c_j^\dagger c_{j-1} - c_{j-1}^\dagger c_j). \quad (2.1.17)$$

A expressão (2.1.16) é a conhecida relação de continuidade, em termos dos operadores de criação c_j^\dagger e aniquilação c_j , a qual pode ser representada pelo diagrama da figura (2.2).

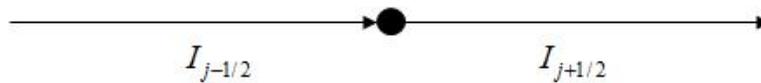


Figura 2.2: Diagrama da corrente que passa pelo plano j .

Apesar do subíndice $j - 1/2$ ter sido escrito para a corrente, pode-se mostrar, através de uma expansão em ondas planas para o elétron, que a corrente no estado estacionário independe do sítio o qual está sendo medida. Dessa forma, será omitido daqui pra frente o subíndice da corrente.

Com a aplicação de um potencial externo na HDB, a corrente medida a uma temperatura

finita será dada pela média da expressão (2.1.17):

$$\bar{I} = \langle I \rangle = \frac{ev}{i\hbar} \left[\langle c_j^\dagger c_{j-1} \rangle - \langle c_{j-1}^\dagger c_j \rangle \right], \quad (2.1.18)$$

sendo $\langle \rangle$ os valores médios do sistema no estado estacionário de não equilíbrio, $\langle c_j^\dagger c_{j-1} \rangle$ o número médio de elétrons que saem do sítio $j-1$ e vão para o sítio j , enquanto $\langle c_{j-1}^\dagger c_j \rangle$ é o número médio de elétrons que pulam do sítio j para o sítio $j-1$. Assim, $\langle I \rangle$ é proporcional ao balanço de cargas que passam do sítio $j-1$ para o sítio j e vice-versa. A figura (2.3) representa a corrente efetiva entre os sítios.

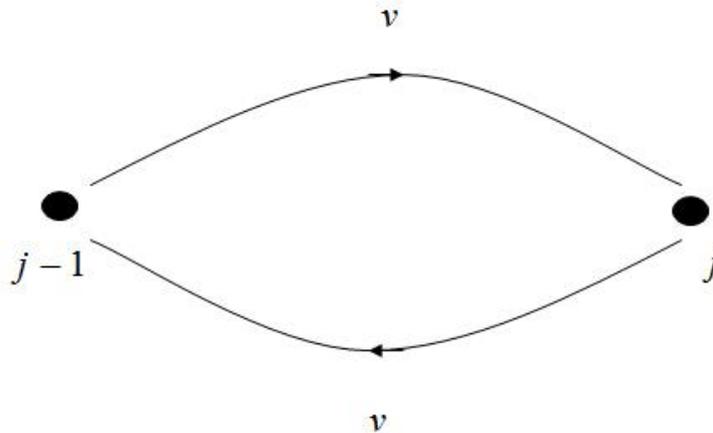


Figura 2.3: Representação da corrente média $\langle I \rangle$ entre os planos $j-1$ e j .

Como o sistema está fora do equilíbrio quando o potencial externo é aplicado, serão introduzidas no próximo capítulo as funções de Green no equilíbrio a temperatura zero, a temperaturas finitas e as equações de Keldysh para o cálculo dos valores médios da corrente (2.1.18) que flui na HDB, a temperaturas finitas.

3 INTRODUÇÃO ÀS FUNÇÕES DE GREEN

3.1 FUNÇÕES DE GREEN A TEMPERATURA ZERO

O estudo de um sistema de muitos corpos é as vezes feito a temperatura zero. Naturalmente, sistemas experimentais reais nunca estarão a temperatura zero, embora estejam muitas vezes em temperaturas baixas. Muitas propriedades do sistema não são sensíveis a temperatura, em especial, baixas temperaturas. Assim sendo, cálculos a temperatura zero são úteis para descrever sistemas reais. Além disso, as propriedades a temperatura zero de um sistema são quantidades conceitualmente importantes para o conhecimento das interações do sistema no estado fundamental. As funções de Green são utilizadas para resolver problemas que não tenham soluções exatas. A aproximação usual é feita da seguinte maneira. Separa-se o hamiltoniano insolúvel H em duas partes

$$H = H_0 + V, \quad (3.1.1)$$

em que H_0 é parte solúvel do sistema e V , o termo restante de H . A escolha de H_0 é feita de tal forma que o efeito de V seja pequeno em relação ao H_0 . O procedimento básico da teoria de muitos corpos ocorre da seguinte forma: No primeiro momento, descreve-se o sistema a partir das soluções conhecidas de H_0 . Logo após, analisam-se as mudanças ocorridas a partir da introdução dos efeitos de V . Neste capítulo será considerado $\hbar = 1$.

As funções de Green dos elétrons a temperatura zero são definidas da seguinte maneira, na representação de Heisenberg:

$$G(\lambda, t - t') = -i \langle | T c_\lambda(t) c_\lambda^\dagger(t') | \rangle, \quad (3.1.2)$$

em que os λ 's representam os principais números quânticos do sistema e T é o operador de ordenamento temporal definido da seguinte maneira:

$$T c_\lambda(t) c_\lambda^\dagger(t') = \theta(t - t') c_\lambda(t) c_\lambda^\dagger(t') - \theta(t' - t) c_\lambda^\dagger(t') c_\lambda(t). \quad (3.1.3)$$

O sinal negativo no segundo termo da equação acima é proveniente da relação de anticomutação dos operadores de criação e destruição dos elétrons em tempos iguais ($\{c_\lambda(t), c_{\lambda'}^\dagger(t)\} = \delta_{\lambda, \lambda'}$), $\theta(t)$ é a função degrau de Heaviside, $|\rangle$ é o estado fundamental desconhecido de H e $c_\lambda(t)$ é dado pela representação de Heisenberg

$$c_\lambda(t) = e^{iHt} c_\lambda e^{-iHt},$$

em que c_λ é o operador de destruição dos estados de H_0 . Convertendo-se a representação de Heisenberg da eq. (3.1.2) para a representação de interação e utilizando-se o teorema de Gell Mann e Low [51], que conecta o estado fundamental de H_0 , representado por: $|\rangle_0$, ao estado fundamental de H , representado por $|\rangle$, obtém-se uma nova relação para as funções de Green:

$$G(\lambda, t - t') = \frac{-i_0 \langle T \hat{c}_\lambda(t) \hat{c}_\lambda^\dagger(t') S(\infty, -\infty) |\rangle_0}{_0 \langle S(\infty, -\infty) |\rangle_0}, \quad (3.1.4)$$

esse resultado é adequado, pois são conhecidos todos os termos que nele existem, em que a matriz S é dada por:

$$S(t, t') = T \left[\exp \left(-i \int_{t'}^t dt_1 \hat{V}(t_1) \right) \right], \quad (3.1.5)$$

e $\hat{c}_\lambda(t)$ é calculado na representação de interação,

$$\hat{c}_\lambda(t) = e^{iH_0 t} c_\lambda e^{-iH_0 t}. \quad (3.1.6)$$

A função de Green também pode ser definida para o caso especial em que não haja interações ($V = 0$), sendo nesse caso a matriz S (3.1.5) igual a identidade. Esta função de Green desempenha um papel especial no formalismo e podemos designá-la por G_0 :

$$G_0(\lambda, t - t') = -i_0 \langle T \hat{c}_\lambda(t) \hat{c}_\lambda^\dagger(t') |\rangle_0. \quad (3.1.7)$$

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

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

$$D(\mathbf{q}, t - t') = -i \langle T A_{\mathbf{q}}(t) A_{-\mathbf{q}}(t') |\rangle, \quad (3.1.8)$$

em que

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

no qual $a_{-\mathbf{q}}^\dagger$ é o operador de criação do fônon com momento $-\mathbf{q}$. Na representação de interação,

a seguinte relação é obtida:

$$D(\mathbf{q}, t - t') = \frac{-i_0 \langle |T \hat{A}_{\mathbf{q}}(t) \hat{A}_{-\mathbf{q}}(t') S(\infty, -\infty)| \rangle_0}{{}_0 \langle |S(\infty, -\infty)| \rangle_0}. \quad (3.1.9)$$

Não há ocorrência de fônons a temperatura zero, assim os estados fundamentais $|\rangle$ e $|\rangle_0$ são iguais ao vácuo $|0\rangle$. Observe-se que em um sistema de elétrons e fônons a notação $|\rangle_0$ significa a combinação dos estados fundamentais dos elétrons e fônons.

A função de Green dos fônons não perturbada é definida como:

$$D_0(\mathbf{q}, t - t') = -i_0 \langle |T \hat{A}_{\mathbf{q}}(t) \hat{A}_{-\mathbf{q}}^\dagger(t')| \rangle_0, \quad (3.1.10)$$

em que

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

3.1.1 Teorema de Wick

A função de Green, eq. (3.1.4), é calculada a partir da expansão em série da equação $S(\infty, -\infty)$ do numerador, tal que:

$$G(\mathbf{p}, t - t') = \sum_{n=0} \frac{(-i)^{n+1}}{n!} \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \dots \int_{-\infty}^{\infty} dt_n \frac{{}_0 \langle |T \hat{c}_{\mathbf{p}}(t) \hat{V}(t_1) \dots \hat{V}(t_n) \hat{c}_{\mathbf{p}}^\dagger(t')| \rangle_0}{{}_0 \langle |S(\infty, -\infty)| \rangle_0}. \quad (3.1.11)$$

No primeiro momento, será ignorado o fator no denominador ${}_0 \langle |S(\infty, -\infty)| \rangle_0$. 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. (3.1.11) 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:

$$\begin{aligned} {}_0 \langle |T \hat{c}_\alpha(t) \hat{c}_\beta^\dagger(t_1) \hat{c}_\gamma(t_2) \hat{c}_\delta^\dagger(t')| \rangle_0 &= {}_0 \langle |T \hat{c}_\alpha(t) \hat{c}_\beta^\dagger(t_1)| \rangle_0 {}_0 \langle |T \hat{c}_\gamma(t_2) \hat{c}_\delta^\dagger(t')| \rangle_0 \\ &- {}_0 \langle |T \hat{c}_\alpha(t) \hat{c}_\delta^\dagger(t')| \rangle_0 {}_0 \langle |T \hat{c}_\gamma(t_2) \hat{c}_\beta^\dagger(t_1)| \rangle_0 \end{aligned} \quad (3.1.12)$$

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

A segunda regra está relacionada 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:

$$\begin{aligned} {}_0\langle |T\hat{c}_{\mathbf{p}}(t)\hat{c}_{\mathbf{p}_1}^\dagger(t_1)\hat{A}_{\mathbf{q}_1}(t_1)\hat{c}_{\mathbf{p}_2}(t_2)\hat{c}_{\mathbf{p}_3}^\dagger(t_3)\hat{A}_{\mathbf{q}}(t_2)| \rangle_0 &= {}_0\langle |T\hat{c}_{\mathbf{p}}(t)\hat{c}_{\mathbf{p}_1}^\dagger(t_1)\hat{c}_{\mathbf{p}_2}(t_2)\hat{c}_{\mathbf{p}_3}^\dagger(t_3)| \rangle_0 \\ &{}_0\langle |T\hat{A}_{\mathbf{q}_1}(t_1)\hat{A}_{\mathbf{q}}(t_2)| \rangle_0 \end{aligned} \quad (3.1.13)$$

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:

$${}_0\langle |T\hat{c}_{\mathbf{k}_1}^\dagger(t)\hat{c}_{\mathbf{k}_2}(t)| \rangle_0 = {}_0\langle |T\hat{c}_{\mathbf{k}_1}^\dagger(t)\hat{c}_{\mathbf{k}_1}(t)| \rangle_0 \delta_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2}. \quad (3.1.14)$$

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. (3.1.11) 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. (3.1.12):

$$\begin{aligned} {}_0\langle |T\hat{c}_\alpha(t)\hat{c}_\beta^\dagger(t_1)\hat{c}_\gamma(t_2)\hat{c}_\delta^\dagger(t')| \rangle_0 &= -\delta_{\alpha\beta}\delta_{\gamma\delta}G_0(\alpha, t-t_1)G_0(\gamma, t_2-t') \\ &+ \delta_{\alpha\delta}\delta_{\gamma\beta}G_0(\alpha, t-t')G_0(\gamma, t_2-t_1). \end{aligned} \quad (3.1.15)$$

3.1.2 Diagramas de Feynman

Feynman introduziu a ideia de representar os termos da eq. (3.1.11) por desenhos chamados de diagramas, 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).

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

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

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

Figura 3.1: Diagramas de Feynman.

Dessa forma, todos os termos encontrados pelo teorema de Wick da integral da eq. (3.1.11) 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).

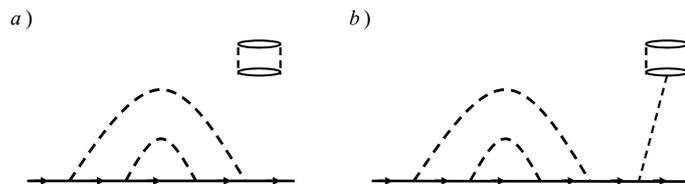


Figura 3.2: a) Diagrama Desconectado b) Diagrama Conectado.

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

3.1.3 Polarização do Vácuo

Considere agora o termo ${}_0\langle |S(\infty, -\infty)| \rangle_0$ da eq.(3.1.11), ignorado anteriormente, dado por:

$${}_0\langle |S(\infty, -\infty)| \rangle_0 = 1 + \frac{(-i)^2}{2!} \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \int_{-\infty}^{\infty} dt_2 \langle |T\hat{V}(t_1)\hat{V}(t_2)| \rangle_0 + \dots \quad (3.1.16)$$

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,

$${}_0\langle |S(\infty, -\infty)| \rangle_0 = \sum_{i=0}^{\infty} F_i. \quad (3.1.17)$$

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. (3.1.11). Assim somente os termos conectados $G_c(\mathbf{p}, t - t')$ contribuem na expansão,

$$\begin{aligned} G(\mathbf{p}, t - t') &= G_c(\mathbf{p}, t - t') \\ &= \sum_{n=0} \frac{(-i)^{n+1}}{n!} \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \dots \int_{-\infty}^{\infty} dt_n \langle |T\hat{c}_{\mathbf{p}}(t)\hat{V}(t_1)\dots\hat{V}(t_n)\hat{c}_{\mathbf{p}}^{\dagger}(t')| \rangle_0 \end{aligned} \quad (3.1.18)$$

O fator $\frac{1}{n!}$ da eq. (3.1.18) também se cancela, pois para cada termo conectado da expansão, haverá um número $n!$ de termos iguais. Assim a eq. (3.1.18) se reduz aos termos conectados e diferentes:

$$\begin{aligned} G(\mathbf{p}, t - t') &= \sum_{n=0} (-i)^{n+1} \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \dots \int_{-\infty}^{\infty} dt_n \langle |T\hat{c}_{\mathbf{p}}(t)\hat{V}(t_1)\dots \\ &\dots\hat{V}(t_n)\hat{c}_{\mathbf{p}}^{\dagger}(t')| \rangle_0, \text{ conectados e diferentes.} \end{aligned} \quad (3.1.19)$$

3.1.4 Equação de Dyson

As funções de Green dos elétrons dependentes da energia são definidas através da transformada de Fourier em relação à variável tempo, como se segue:

$$G(\mathbf{p}, E) = \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{iE(t-t')} G(\mathbf{p}, t - t'). \quad (3.1.20)$$

Para uma partícula independente na banda de condução, é obtido o seguinte resultado para função de Green não perturbada:

$$G_0(\mathbf{p}, E) = \frac{1}{E - \varepsilon_{\mathbf{p}} + i\eta}, \quad (3.1.21)$$

em que $\varepsilon_{\mathbf{p}}$ é a energia do elétron e η é uma quantidade infinitesimal.

A transformada de Fourier no tempo da função de Green em série é dada por:

$$G(\mathbf{p}, E) = \sum_{n=0}^{\infty} (-i)^{n+1} \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{iE(t-t')} \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \dots \int_{-\infty}^{\infty} dt_n \\ \times {}_0\langle T \hat{c}_{\mathbf{p}}(t) \hat{V}(t_1) \dots \hat{V}(t_n) \hat{c}_{\mathbf{p}}^{\dagger}(t') \rangle_{0,,} \text{ conectados e diferentes} \quad (3.1.22)$$

Para fônons, a definição de função de Green dependente da energia é análoga a dos elétrons:

$$D(\mathbf{q}, \omega) = \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega t} D(\mathbf{q}, t). \quad (3.1.23)$$

Considerando-se a interação entre elétron e fônon dada por:

$$V = \sum_{\mathbf{qk}} M_{\mathbf{q}} A_{\mathbf{q}} c_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^{\dagger} c_{\mathbf{q}}, \quad (3.1.24)$$

obtêm-se os dois primeiros termos da expansão da função de Green no espaço das energias.

$$G(\mathbf{p}, E) = G_0(\mathbf{p}, E) + G_0(\mathbf{p}, E)^2 \Sigma^1(\mathbf{p}, E), \quad (3.1.25)$$

na qual a auto-energia do elétron ($\Sigma^1(\mathbf{p}, E)$) devida aos processos com um fônon é igual a:

$$\Sigma^1(\mathbf{p}, E) = i \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \sum_{\mathbf{q}} M_{\mathbf{q}}^2 D_0(\mathbf{q}, \omega) G_0(\mathbf{p} - \mathbf{q}, E - \omega). \quad (3.1.26)$$

Calculando-se os termos de ordem superior da função de Green perturbada, encontra-se a seguinte relação:

$$G(\mathbf{p}, E) = G_0(\mathbf{p}, E) [1 + G_0 \Sigma^1 + (G_0 \Sigma^1)^2 + G_0 \Sigma^{2a} + G_0 \Sigma^{2b} + G_0 \Sigma^{2c} + \dots], \quad (3.1.27)$$

sendo os termos $(\Sigma^1)^2$, Σ^{2a} , Σ^{2b} e Σ^{2c} as auto-energias devidas aos processos de dois fônons, representadas nos diagramas da figura (3.3).

Fazendo-se a soma formal da série (3.1.27), obtém-se a equação de Dyson é:

$$G(\mathbf{p}, E) = G_0(\mathbf{p}, E) + G_0(\mathbf{p}, E) \Sigma(\mathbf{p}, E) G(\mathbf{p}, E), \quad (3.1.28)$$

em que a auto-energia total ($\Sigma(\mathbf{p}, E)$) é a soma de todos diagramas de auto-energias irreduzíveis

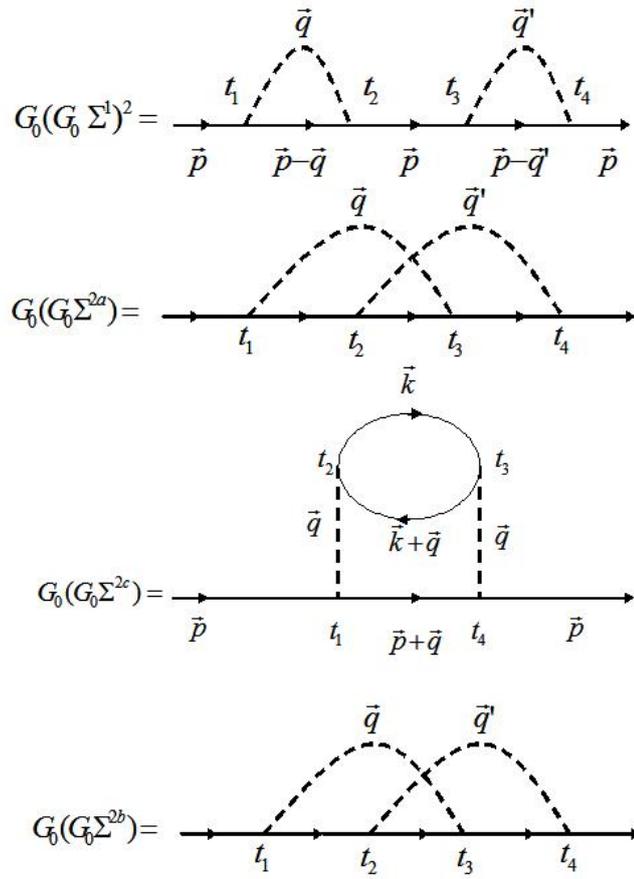


Figura 3.3: Diagramas de Feynman para processos de dois fônons .

(conectados e diferentes).

$$\Sigma(\mathbf{p}, E) = \sum_i \Sigma^i(\mathbf{p}, E)$$

3.2 FUNÇÕES DE GREEN A TEMPERATURA FINITA

As funções de Green dependentes da temperatura serão introduzidas nesta secção, pois em muitos casos a temperatura influencia nas experiências.

Considere a hipótese em que o sistema de elétrons ou de fônons esteja interagindo com um reservatório térmico de tal forma que a temperatura e o potencial químico do sistema se mantenham constantes. Deste modo, a função de Green de Matsubara é definida como:

$$\begin{aligned} G'(\mathbf{p}, \tau - \tau') &= -\langle T_\tau c_{\mathbf{p}}(\tau) c_{\mathbf{p}}^\dagger(\tau') \rangle \\ &= -Tr \left(e^{-\beta(K - \Omega)} T_\tau e^{\tau K} c_{\mathbf{p}} e^{-K(\tau - \tau')} c_{\mathbf{p}}^\dagger e^{\tau' K} \right), \end{aligned} \quad (3.2.1)$$

$$Z = e^{-\beta\Omega} = Tr(e^{-\beta K}) \quad (3.2.2)$$

e

$$K = H - \mu N, \quad (3.2.3)$$

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 (3.1.1) e N o operador número. Observe-se que é utilizado o ensemble grand-canônico na definição da função de Matsubara. O domínio da relação (3.2.1) se encontra em:

$$-\beta \leq \tau \leq \beta.$$

O operador T_τ organiza os operadores de tal maneira que aqueles que estiverem perto de $-\beta$ fiquem à direita daqueles que estiverem mais longe. As funções de Green de Matsubara podem ser expandidas em séries de Fourier,

$$G'(\mathbf{p}, \tau) = \frac{1}{\beta} \sum_n e^{-i\omega_n \tau} G'(\mathbf{p}, i\omega_n), \quad (3.2.4)$$

$$G'(\mathbf{p}, i\omega_n) = \int_{-\beta}^{\beta} d\tau G'(\mathbf{p}, \tau) e^{i\tau\omega_n}, \quad (3.2.5)$$

em que ω_n são múltiplos ímpares de π/β para férmions. Como na função de Green a temperatura zero, obtém-se a seguinte função de Matsubara não perturbada ($V = 0$) para os elétrons,

$$G_0'(\mathbf{p}, i\omega_n) = \frac{1}{\omega_n - \xi_{\mathbf{p}}}. \quad (3.2.6)$$

a qual será utilizada na expansão da função de Matsubara.

As funções de Matsubara são calculadas por métodos similares às técnicas utilizadas nas funções de Green a temperatura zero. A principal diferença entre os cálculos está na variável tempo que é real na função de Green à temperatura zero e imaginária na função de Matsubara.

Definindo:

$$S(\tau_1, \tau_2) = T_\tau \exp \left[- \int_{\tau_1}^{\tau_2} d\tau \hat{V}(\tau) \right] \quad (3.2.7)$$

e utilizando-se a seguinte notação:

$$Tr[e^{-\beta K_0} \theta] = {}_0 \langle \theta \rangle, \quad (3.2.8)$$

no qual $K_0 = H_0 - \mu N$ e θ é um operador qualquer. Dessa forma, a seguinte expressão para eq.

(3.2.1) é obtida:

$$G'(\mathbf{p}, \tau) = -\frac{{}_0\langle T_\tau [S(\beta)\hat{c}_\mathbf{p}(\tau)\hat{c}_\mathbf{p}^\dagger(0)] \rangle}{{}_0\langle S(\beta) \rangle}, \quad (3.2.9)$$

em que:

$$\hat{c}_\mathbf{p}(\tau) = e^{\tau K_0} c_\mathbf{p} e^{-\tau K_0}. \quad (3.2.10)$$

A relação (3.2.9) é similar à (3.1.4). Expandindo-se novamente em séries a matriz S , utilizando-se o teorema de Wick, temos que a equação de Matsubara (3.2.9) é reduzida a uma soma de todos os termos diferentes e conectados dos diagramas de Feynmann.

$$G'(\mathbf{p}, \tau) = -\sum_{n=0} (-1)^n \int_0^\beta d\tau_1 \dots \int_0^\beta dt_n \times {}_0\langle |T\hat{c}_\mathbf{p}(\tau)\hat{V}(\tau_1)\dots\hat{V}(\tau_n)\hat{c}_\mathbf{p}^\dagger(0)| \rangle, \quad \text{conectados e diferentes.} \quad (3.2.11)$$

Tomando-se a transformada de Fourier na série (3.2.11), encontra-se a relação de Dyson para as funções de Green de Matsubara, dada por:

$$G'(\mathbf{p}, i\omega) = G'_0(\mathbf{p}, i\omega) + G'_0(\mathbf{p}, i\omega)\Sigma(\mathbf{p}, i\omega)G'(\mathbf{p}, i\omega), \quad (3.2.12)$$

em que $\Sigma(\mathbf{p}, i\omega)$ é a soma de todas as auto-energias associadas a cada termo da série (3.2.11).

Tão importantes quanto as funções de Matsubara são as funções de Green Retardadas e Avançadas, definidas das seguintes formas.

Função de Green Retardada:

$$G^r(\mathbf{p}, t - t') = -i\theta(t - t') \langle [c_\mathbf{p}(t)c_\mathbf{p}^\dagger(t') + c_\mathbf{p}^\dagger(t')c_\mathbf{p}(t)] \rangle. \quad (3.2.13)$$

Função de Green Avançada:

$$G^a(\mathbf{p}, t - t') = i\theta(t' - t) \langle [c_\mathbf{p}(t)c_\mathbf{p}^\dagger(t') + c_\mathbf{p}^\dagger(t')c_\mathbf{p}(t)] \rangle, \quad (3.2.14)$$

em que

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

com tais funções, podemos encontrar valores para a condutividade e susceptibilidade elétrica dos sistemas.

3.3 FUNÇÕES DE GREEN FORA DO EQUILÍBRIO

Foram introduzidas nas secções anteriores as funções de Green a temperatura igual zero e diferente de zero Kelvin no equilíbrio. Contudo, o sistema (HDB) em estudo deixa o equilíbrio a partir do momento em que se liga o potencial externo. Dessa forma, a temperatura e o potencial não estão definidas nas regiões da dupla barreira, somente nos reservatórios de contatos. Por isso, será visto nesta secção, parcialmente, um formalismo que considera as funções Green em sistemas fora do equilíbrio termodinâmico.

Nos sistemas fora do equilíbrio não existem garantias de que o estado volte a seu estado inicial depois de um grande intervalo no tempo, diferentemente do que ocorre nos sistemas em equilíbrio. A teoria fora do equilíbrio é um pouco mais complicada do que a teoria no equilíbrio, porém são similares em suas estruturas. Considere-se que a evolução se dá sob o seguinte hamiltoniano,

$$H = h + H'(t), \quad (3.3.1)$$

$$h = H_0 + H_i, \quad (3.3.2)$$

em que H_0 é a parte solúvel do sistema e H_i é a parte ‘complicada’ que está relacionada a interação de muitos corpos. Supondo-se que a parte fora do equilíbrio $H'(t)$ desapareça para tempos $t < t_0$, antes da perturbação ser ligada, o sistema poderá ser descrito pela matriz densidade do equilíbrio térmico:

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

O valor esperado de um dado observável, para o qual associa-se o operador O na mecânica quântica, para tempos $t \geq t_0$, é dado por:

$$\langle O(t) \rangle = \text{Tr}[\rho(h)O_H(t)]. \quad (3.3.3)$$

O subscrito H indica que a dependência temporal é governada pela hamiltoniana total, i.e., o operador O está escrito na representação de Heisenberg. Como o valor médio (3.3.3) contém termos complicados como H_i e $H'(t)$, é preciso seguir alguns passos antes de calculá-lo. O primeiro deles é mudar dependência temporal de $O_H(t)$ para $O_h(t)$ da seguinte forma:

$$O_H(t) = v_h^\dagger(t, t_0)O_h(t)v_h(t, t_0), \quad (3.3.4)$$

em que

$$v_h(t, t_0) = T \left\{ \exp \left[-i \int_{t_0}^t dt' H'_h(t') \right] \right\} \quad (3.3.5)$$

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

$$H'_h(t) = e^{ih(t-t_0)} H'(t) e^{-ih(t-t_0)}. \quad (3.3.6)$$

Será introduzida agora a integral de contorno. A expressão (3.3.4) pode ser escrita em uma outra forma que é equivalente a primeira.

$$O_H(t) = T_{C_t} \left\{ \exp \left[-i \int_{C_t} d\tau H'_h(\tau) \right] O_h(t) \right\}. \quad (3.3.7)$$

sendo o contorno C_t descrito pela figura (3.4).

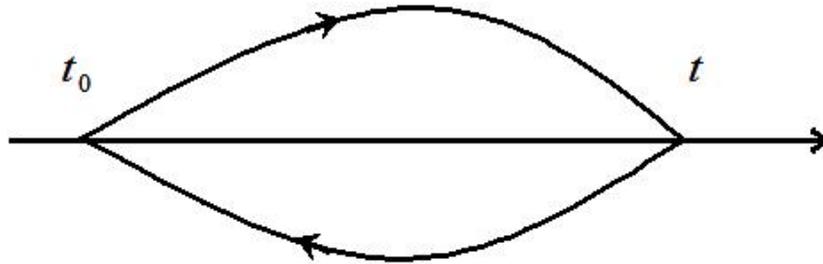


Figura 3.4: Contorno C_t .

O contorno C_t envolve o eixo real saindo de t_0 até t e voltando ao ponto inicial. Foi empregada a convenção de se utilizar letras gregas para as variáveis complexas e letras romanas para variáveis reais. O operador T_{C_t} organiza temporalmente os operadores sobre o contorno, colocando mais a direita aqueles em que a curva ultrapassa primeiro. Esse operador de ordenação do contorno é um forte instrumento formal que permite o desenvolvimento da teoria fora do equilíbrio em linhas paralelas à teoria do equilíbrio.

A função de Green é definida da seguinte maneira no contorno:

$$G(1, 1') \equiv -i \langle T_C [\psi_H(1) \psi_H^\dagger(1')] \rangle, \quad (3.3.8)$$

no qual a curva C que envolve o eixo real inicia e termina no ponto t_0 , passando por t_1 e t'_1 , como mostra a figura (3.5). Na relação (3.3.8), $\psi_H(1)$ e $\psi_H^\dagger(1')$ são os operadores de campo de fermions,

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

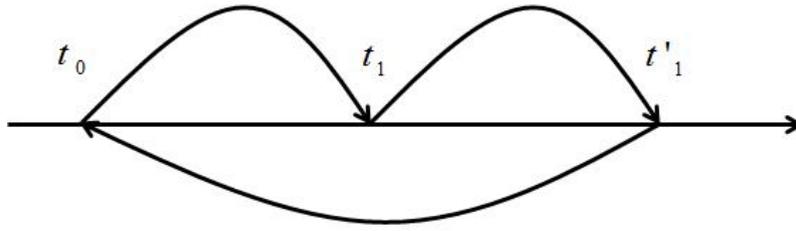


Figura 3.5: Contorno C .

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

na representação de Heisenberg. Foi utilizada na definição anterior uma notação reduzida dada por: $(1) \equiv (\mathbf{r}_1, t_1)$. Os operadores de campo ψ e ψ^\dagger atuam no espaço do número de ocupação de Hilbert, desde que sejam representados em termos de $c_{\mathbf{k}}$ e $c_{\mathbf{k}}^\dagger$ respectivamente. As funções de ondas $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ formam um conjunto completo de autofunções das partícula independentes rotuladas pelo momento \mathbf{k} .

Dependendo da maneira com que a curva C da figura (3.5) encontra os pontos t_1 e t'_1 , é possível haver quatro funções de Green distintas provenientes da definição (3.3.8):

$$G(1, 1') = \begin{cases} G_c(1, 1'), & t_1, t'_1 \in C_1 \\ G^>(1, 1'), & t_1 \in C_2, t'_1 \in C_1 \\ G^<(1, 1'), & t_1 \in C_1, t'_1 \in C_2 \\ G_{\bar{c}}(1, 1'), & t_1, t'_1 \in C_2 \end{cases} \quad (3.3.9)$$

em que C_1 é ramo da curva acima do eixo real, C_2 é o ramo abaixo, G_c é a função de Green causal,

$$G_c(1, 1') = -i\langle T[\psi_H(1)\psi_H^\dagger(1')] \rangle, \quad (3.3.10)$$

$G^>$ é a função maior,

$$G^>(1, 1') = -i\langle [\psi_H(1)\psi_H^\dagger(1')] \rangle, \quad (3.3.11)$$

$G^<$ é a função menor,

$$G^<(1, 1') = i\langle [\psi_H^\dagger(1')\psi_H(1)] \rangle \quad (3.3.12)$$

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

$$G_{\bar{c}}(1, 1') = -i\langle \tilde{T}[\psi_H(1)\psi_H^\dagger(1')] \rangle. \quad (3.3.13)$$

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.

As funções de Green avançadas e retardadas fora do equilíbrio são definidas como:

$$G^a(1, 1') = \theta(t'_1 - t_1)[G^<(1, 1') - G^>(1, 1')] \quad (3.3.14)$$

e

$$G^r(1, 1') = \theta(t_1 - t'_1)[G^>(1, 1') - G^<(1, 1')]. \quad (3.3.15)$$

Após essas definições, a função de Green de contorno ordenado será reduzida a uma nova relação em que o teorema de Wick poderá ser aplicado, processo similar ao das secções anteriores. O primeiro passo é mudar a dependência H para h em (3.3.8), assim:

$$G(1, 1') = -i\langle T_C[S_C^H \psi_h(1)\psi_h^\dagger(1')] \rangle, \quad (3.3.16)$$

sendo

$$S_C^H = \exp \left[-i \int_C d\tau H'_h(\tau) \right]. \quad (3.3.17)$$

Ainda é preciso de mais uma transformação para demonstrar a existência de uma teoria de perturbação diagramática. Lembre-se que o operador h contém dois termos, $h = H_0 + H_i$, e que o teorema de Wick trabalha somente com H_0 (i.e. hamiltonianos quadráticos). Assim o segundo passo é mudar a dependência h para H_0 em (3.3.17). Os detalhes das transformações são extensos [52], sendo o resultado final dado por:

$$G(1, 1') = -i \frac{\text{Tr} \left\{ \rho_0 T_{C_v} \left[S_{C_v}^i S_C^i \psi_{H_0}(1) \psi_{H_0}^\dagger(1') \right] \right\}}{\text{Tr} \left[\rho_0 T_{C_v} (S_{C_v}^i S_C^i) \right]}, \quad (3.3.18)$$

no qual

$$\rho_0 = \frac{\exp(-\beta H_0)}{\text{Tr}[\exp(-\beta H_0)]}, \quad (3.3.19)$$

$$S'_C = \exp \left[-i \int_C d\tau H'_{H_0}(\tau) \right] \quad (3.3.20)$$

e

$$S^i_{C_v} = \exp \left[-i \int_{C_v} d\tau H^i_{H_0}(\tau) \right], \quad (3.3.21)$$

sendo a dependência do hamiltoniano com o tempo definida em analogia à relação (3.3.6). Além disso, o contorno C foi definido pela figura (3.5), enquanto a curva C_v é definida pela figura (3.6).

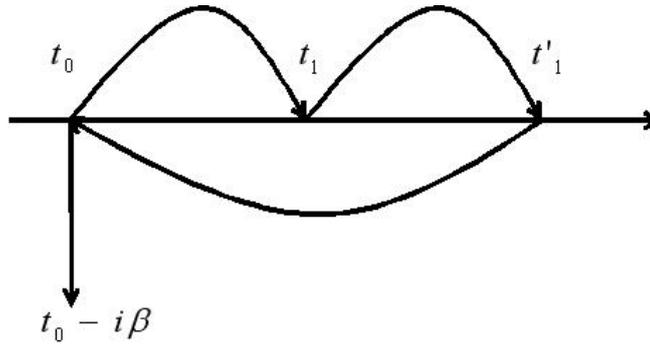


Figura 3.6: Contorno C_v .

Apesar da aparência, a equação (3.3.18) é um resultado de grande importância, pois utilizam-se relações exatas para encontrá-la, a sua dependência é regida pela parte solúvel do hamiltoniano (H_0) e a matriz densidade quadrática ($\sim \exp -\beta H_0$) permite a utilização do teorema de Wick. Assim, os diagramas de Feynman podem ser construídos para os problemas fora do equilíbrio. Novamente o denominador de (3.3.18) cancela-se com a contribuição decorrente dos diagramas desconectados. Assim as teorias fora do equilíbrio e no equilíbrio são similares: a diferença é que a última considera a integral de contorno em torno do eixo real enquanto a primeira considera a integral sobre o eixo real.

3.3.1 Equação de Dyson fora do equilíbrio

Apesar do resultado (3.3.18) ser de grande importância, este ainda continua sendo matematicamente impraticável, a menos que sejam trocadas as integrais de contorno por integrais no eixo real. Este procedimento é chamado de continuação analítica e existem algumas formulações diferentes na literatura. Serão mostradas nesta secção a equação de Dyson em termos das matrizes sugerida por Craig [53].

Novamente é possível expandir a função de Green (3.3.18) fora do equilíbrio em termos da

função de Green de equilíbrio com o tempo ordenado. Consequentemente, dado que o funcional de autoenergia seja bem definido, a seguinte equação de Dyson para sistemas fora do equilíbrio é obtida:

$$G(1,2) = G_0(1,2) + \int d^3x_3 \int d^3x_4 \int_{C_v} d\tau_3 \int_{C_v} d\tau_4 G_0(1,3) \Sigma(3,4) G(4,2), \quad (3.3.22)$$

no qual as interações estão contidas na autoenergia (irreduzível) $\Sigma[G]$. Fazendo-se o limite $t_0 \rightarrow \infty$ na eq. (3.3.22), conclui-se que o contorno C_v coincidirá com C , devendo-se assim ser considerado somente C .

A equação de Dyson fora do equilíbrio também pode ser dada em termos da seguintes equação matricial ([54]).

$$\tilde{\mathbf{G}}(1,2) = \tilde{\mathbf{G}}_0(1,2) + \int d^3x_3 \int d^3x_4 \int_C d\tau_3 \int_C d\tau_4 \tilde{\mathbf{G}}_0(1,3) \tilde{\Sigma}(3,4) \tilde{\mathbf{G}}(4,2), \quad (3.3.23)$$

sendo

$$\tilde{\mathbf{G}} = \begin{bmatrix} G_c & -G^< \\ G^> & -G_{\bar{c}} \end{bmatrix}, \quad (3.3.24)$$

$$\tilde{\Sigma} = \begin{bmatrix} \Sigma_c & -\Sigma^< \\ \Sigma^> & -\Sigma_{\bar{c}} \end{bmatrix}. \quad (3.3.25)$$

A matriz não perturbada $\tilde{\mathbf{G}}_0$ é descrita pela seguinte relação diferencial não homogênea:

$$\left(i \frac{\partial}{\partial t} - \hat{H} \right) \tilde{G}_{0\alpha\beta}(\vec{r} - \vec{r}', t - t') = \delta(\vec{r} - \vec{r}') \delta(t - t') \delta_{\alpha\beta}, \quad (3.3.26)$$

em que

$$\tilde{G}_{0\alpha\beta} = \begin{cases} G_{0c}, & \text{para } \alpha = \beta = 1 \\ -G_{0\bar{c}}, & \text{para } \alpha = \beta = 2 \\ -G_0^<, & \text{para } \alpha = 1, \beta = 2 \\ G_0^>, & \text{para } \alpha = 2, \beta = 1. \end{cases}$$

Mudando-se a notação da equação (3.3.23), de tal modo que o produto de matrizes signifique também uma integral sobre as quatro variáveis ($d\vec{r}, d\tau$), obtém-se uma relação conden-

sada para a equação de Dyson, similar às encontradas anteriormente:

$$\tilde{\mathbf{G}} = \tilde{\mathbf{G}}_0 + \tilde{\mathbf{G}}_0 \tilde{\Sigma} \tilde{\mathbf{G}}. \quad (3.3.27)$$

3.3.2 Teorema de Langreth

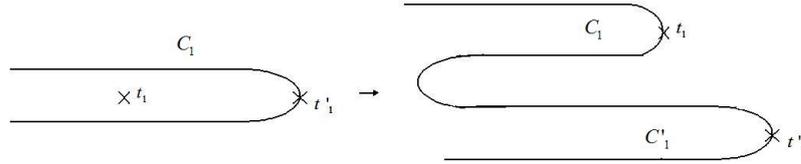


Figura 3.7: Deformação do contorno C .

Na equação de Dyson (3.3.22), foram encontradas produtos das funções de Green da seguinte forma:

$$C(\tau_1, \tau'_1) = \int_C d\tau A(\tau_1, \tau) B(\tau, \tau'_1), \quad (3.3.28)$$

nos quais C , A , B são funções de Green quaisquer com ordenamento temporal dado T_C . Para calcular (3.3.28) é preciso considerar $t_1 <_c t'_1$, isto é, t'_1 vem posteriormente a t_1 ao longo do contorno, conforme ilustramos na Fig. (3.7). Isso corresponde a $C^<(\tau_1, \tau'_1)$, como definido na eq. (3.3.9). A eq (3.3.28) pode então ser expressa na seguinte forma:

$$C^<(t_1, t'_1) = \int_{-\infty}^{t_1} d\tau A(t_1, \tau) B(\tau, t'_1) + \int_{t_1}^{t'_1} d\tau A(t_1, \tau) B(\tau, t'_1) + \int_{t'_1}^{-\infty} d\tau A(t_1, \tau) B(\tau, t'_1). \quad (3.3.29)$$

Reescrevendo-se a integral $\int_{t'_1}^{t_1}$ na forma $\int_{t'_1}^{t_1} = \int_{t_1}^{-\infty} + \int_{-\infty}^{t'_1}$, a equação acima torna-se:

$$C^<(t_1, t'_1) = \int_{-\infty}^{t_1} d\tau A(t_1, \tau) B(\tau, t'_1) + \int_{t_1}^{-\infty} d\tau A(t_1, \tau) B(\tau, t'_1) + \int_{-\infty}^{t'_1} d\tau A(t_1, \tau) B(\tau, t'_1) + \int_{t'_1}^{-\infty} d\tau A(t_1, \tau) B(\tau, t'_1). \quad (3.3.30)$$

A eq. (3.3.30) equivale ao contorno ilustrado na fig. (3.7). O procedimento de se deformar o contorno C para efetuar a continuação analítica de um produto de funções de Green foi originalmente proposto por D. C. Langreth [55]. Aplicando-se as definições de função de Green menor e maior obtêm-se, por exemplo, para o primeiro termo: $\int_{-\infty}^{t_1} d\tau A(t_1, \tau) B(\tau, t'_1)$. Note-se que temos $A^>(t_1, \tau)$ e $B^<(\tau, t'_1)$, pois a integral $\int_{-\infty}^{t_1}$ envolve tempos t menores do que t_1 e t'_1 no

sentido do contorno. A expressão completa está apresentada abaixo:

$$C^<(t_1, t'_1) = \int_{-\infty}^{t_1} dt A^>(t_1, t) B^<(t, t'_1) + \int_{t_1}^{-\infty} dt A^<(t_1, t) B^<(t, t'_1) \\ + \int_{-\infty}^{t'_1} dt A^<(t_1, t) B^<(t, t'_1) + \int_{t'_1}^{-\infty} dt A^<(t_1, t) B^>(t, t'_1). \quad (3.3.31)$$

Nessa última equação o ordenamento ao longo do contorno é conhecido, pois as funções de Green menor e maior possuem um ordenamento bem definido. Invertendo-se agora os limites de integração no segundo e quarto termos e agrupando-os com o primeiro e terceiro, respectivamente, obtém-se:

$$C^<(t_1, t'_1) = \int_{-\infty}^{t_1} dt [A^>(t_1, t) - A^<(t_1, t)] B^<(t, t'_1) \\ + \int_{-\infty}^{t'_1} dt A^<(t_1, t) [B^<(t, t'_1) - B^>(t, t'_1)]. \quad (3.3.32)$$

É possível estender os limites de integração até $+\infty$, utilizando-se funções degrau como abaixo:

$$C^<(t_1, t'_1) = \int_{-\infty}^{\infty} dt \theta(t_1 - t) [A^>(t_1, t) - A^<(t_1, t)] B^<(t, t'_1) \\ + \int_{-\infty}^{\infty} dt A^<(t_1, t) \theta(t'_1 - t) [B^<(t, t'_1) - B^>(t, t'_1)]. \quad (3.3.33)$$

Usando-se agora as definições de funções de Green avançada e retardada, eqs. (3.3.14) e (3.3.15), obtém-se:

$$C^<(t_1, t'_1) = \int_{-\infty}^{\infty} dt A^r(t_1, t) B^<(t, t'_1) + \int_{-\infty}^{\infty} dt A^<(t_1, t) B^a(t, t'_1). \quad (3.3.34)$$

Para a função de Green maior, $C^>(t_1, t'_1)$, basta trocar $<$ por $>$ na equação (3.3.33). Esse resultado pode ser facilmente generalizado para um produto de três funções de Green. Se houvesse, por exemplo, um produto de funções de Green $C = ABE$ ¹ obter-se-ia para $C^<$ a seguinte relação:

$$C^< = A^r B^r E^< + A^r B^< E^a + A^< B^a E^a. \quad (3.3.35)$$

A função de Green retardada é obtida, substituindo-se (3.3.34) e a respectiva expressão para

¹Nessa notação compacta o produto de duas funções de Green corresponde a uma integração na variável temporal.

$C^>(t_1, t'_1)$ na eq.(3.3.15). Com isso, encontra-se,

$$\begin{aligned}
C^r(t_1, t'_1) &= \theta(t_1 - t'_1)[C^>(t_1, t'_1) - C^<(t_1, t'_1)] \\
&= \theta(t_1 - t'_1) \int_{-\infty}^{\infty} dt [A^r(B^> - B^<) + (A^> - A^<)B^a] \\
&= \theta(t_1 - t'_1) \int_{-\infty}^{\infty} dt [A^r(B^r - B^a) + (A^r - A^a)B^a] \\
&= \theta(t_1 - t'_1) \int_{-\infty}^{\infty} dt [A^r B^r - A^a B^a] = \int_{-\infty}^{\infty} dt A^r(t_1, t) B^r(t, t'_1). \quad (3.3.36)
\end{aligned}$$

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: $C^a(t_1, t'_1) = \int_{-\infty}^{\infty} dt A^a(t_1, t) B^a(t, t'_1)$.

Outras relações de Langreth podem ser encontradas em [56].

3.3.3 Equação de Keldysh

Nesta secção será apresentada a formulação de Keldysh [11] para as equações de movimento das funções de Green fora do equilíbrio. Um método diferente, mas equivalente ao de Keldysh é o método de Kadanoff-Baym [57]. Historicamente, os cálculos de Keldysh e Kadanoff-Baym foram feitos independentemente e quase simultaneamente.

Para chegar a formulação de Keldysh, é preciso partir de uma matriz de rotação de $\pi/4$ radianos no plano complexo, dada por:

$$\mathbf{U} \equiv \frac{1}{\sqrt{2}}(\mathbf{I} + i\sigma_y) \quad (3.3.37)$$

e

$$\mathbf{U}^\dagger = \mathbf{U}^{-1} \equiv \frac{1}{\sqrt{2}}(\mathbf{I} - i\sigma_y), \quad (3.3.38)$$

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

$$\sigma_y = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}. \quad (3.3.39)$$

Multiplicando-se a relação (3.3.27) por: \mathbf{U}^\dagger à esquerda e \mathbf{U} à direita, e depois introduzindo-se $\mathbf{U}\mathbf{U}^\dagger = \mathbf{I}$, encontra-se:

$$\tilde{\mathbf{G}}' = \tilde{\mathbf{G}}'_0 + \tilde{\mathbf{G}}'_0 \tilde{\Sigma}' \tilde{\mathbf{G}}', \quad (3.3.40)$$

em que

$$\tilde{\mathbf{G}}' = \begin{bmatrix} G^a & 0 \\ G^k & G^r \end{bmatrix}, \quad (3.3.41)$$

$$\tilde{\Sigma}' = \begin{bmatrix} \Sigma^a & 0 \\ \Sigma^k & \Sigma^r \end{bmatrix}. \quad (3.3.42)$$

A função de Keldysh G^k [57] é definida por:

$$G^k \equiv G_c + G_{\bar{c}} = G^< + G^>, \quad (3.3.43)$$

enquanto a função de Green avançada pode ser dada por:

$$G^a = G_c - G^> = G^> - G_{\bar{c}}, \quad (3.3.44)$$

e a função de de Green retardada pode ser dada por:

$$G^r = G_c - G^< = G^< - G_{\bar{c}}. \quad (3.3.45)$$

As relações das componentes de $\tilde{\Sigma}'$ são análogas as eqs. (3.3.43), (3.3.44) e (3.3.45). Fazendo-se o produto e a soma de matrizes do segundo termo à direita da expressão (3.3.40), obtêm-se as seguintes relações de Dyson para as funções de Green avançada e retardada:

$$G^r = G_0^r + G_0^r \Sigma^r G^r, \quad (3.3.46)$$

$$G^a = G_0^a + G_0^a \Sigma^a G^a. \quad (3.3.47)$$

Pela análise das relações acima, observa-se que as componentes avançada e retardada da matriz $\tilde{\mathbf{G}}'$ são independentes, i.e. dependem somente de outras funções avançadas e retardadas. Contudo as componente da função de Keldysh é dada por:

$$G^k = G_0^k + G_0^k \Sigma^a G^a + G_0^r \Sigma^r G^k + G_0^r \Sigma^k G^a \quad (3.3.48)$$

Procedendo-se uma iteração na relação (3.3.48) com respeito à G^k e após um reagrupamento dos termos, encontra-se a seguinte relação:

$$\begin{aligned} G^k &= (1 + G_0^r \Sigma^r) G_0^k (1 + \Sigma^a G^a) + (G_0^r + G_0^r \Sigma^r G_0^r) \Sigma^k G^a \\ &+ G_0^r \Sigma^r G_0^r \Sigma^r G^k. \end{aligned} \quad (3.3.49)$$

Pela repetição da mesma iteração infinitas vezes, obtém-se a conhecida relação de Keldysh [11],

$$G^k = (1 + G^r \Sigma^r) G_0^k (1 + \Sigma^a G^a) + G^r \Sigma^k G^a. \quad (3.3.50)$$

O resultado da relação (3.3.50) seria o mesmo se ao invés da função G^k fosse utilizada a função $G^<$, isto é:

$$G^< = (1 + G^r \Sigma^r) G_0^< (1 + \Sigma^a G^a) + G^r \Sigma^< G^a. \quad (3.3.51)$$

A equação de Keldysh (3.3.51) será utilizada para o cálculo da corrente no sistema de heteroestrutura de dupla barreira fora do equilíbrio.

4 FUNÇÕES DE GREEN PARA UM HAMILTONIANO DE HETEROESTRUTURAS SEMICONDUTORAS

4.1 CÁLCULO DAS FUNÇÕES DE GREEN

Neste capítulo serão calculadas as funções de Green retardadas e a corrente da HDB sem levar em consideração a interação entre elétron e fônon. Para tais cálculos, separou-se,

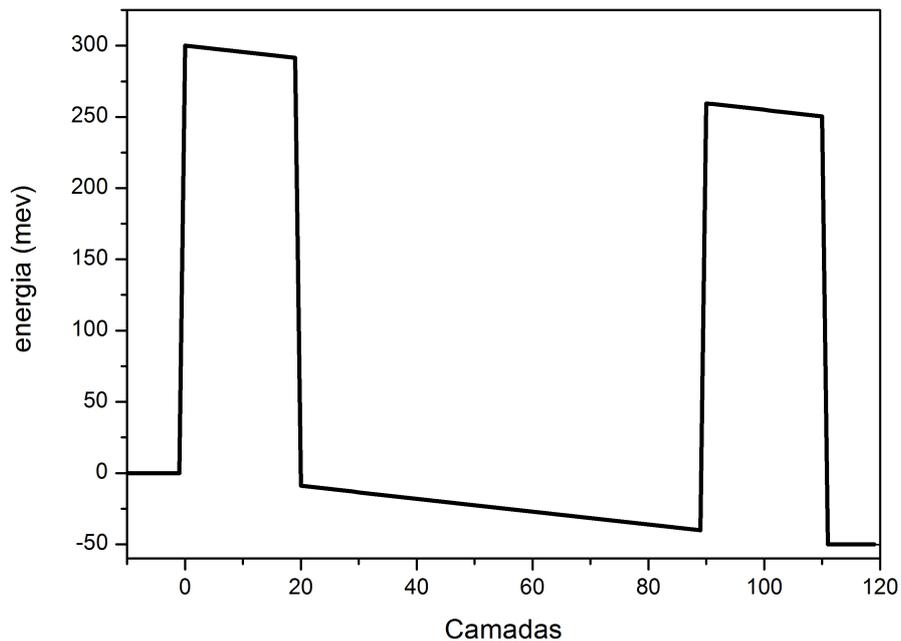


Figura 4.1: Perfil do potencial da HDB em relação às camadas j .

através de um corte, o perfil do potencial da dupla barreira (figura 4.1) em três regiões: a região do poço quântico (ou região de espalhamento), que se encontra entre $0 \leq j < N - 1$, sendo representada pela letra s e as regiões das semi-cadeias à esquerda (ou região emissora) e à direita (ou região coletora), que se encontram em $j < 0$ e $j \geq N$, sendo representadas pela letras l e r respectivamente. Desta forma, cada região separada da HDB está em equilíbrio

e cada semicadeia infinita de átomos pode ser representada como um reservatório de elétrons que possui uma determinada energia de Fermi. O sistema voltará a ficar fora do equilíbrio quando forem reconectadas as semicadeias ao poço quântico. Sabendo-se disso, as funções de Green de equilíbrio das três regiões separadas são obtidas primeiramente para, em seguida, serem reconectadas via ‘hopping’. Esse processo torna possível a obtenção da transmitância dos elétrons da região à direita para a região à esquerda da HDB. O hamiltoniano eletrônico que descreve o sistema desconectado é dado da seguinte forma:

$$\hat{H}_e = \hat{H}_0 + \hat{H}', \quad (4.1.1)$$

$$\hat{H}_0 = \hat{H}_l + \hat{H}_s + \hat{H}_r, \quad (4.1.2)$$

$$\hat{H}_l = \sum_{j=-\infty}^{-1} \left\{ \varepsilon'_j c_j^\dagger c_j + v \left(c_j^\dagger c_{j-1} + c_{j-1}^\dagger c_j \right) \right\}, \quad (4.1.3)$$

$$\hat{H}_r = \sum_{j=N}^{\infty} \left\{ \varepsilon'_j c_j^\dagger c_j + v \left(c_j^\dagger c_{j+1} + c_{j+1}^\dagger c_j \right) \right\}, \quad (4.1.4)$$

$$\hat{H}_s = \sum_{j=0}^{N-1} \left\{ \varepsilon'_j c_j^\dagger c_j + v \left(c_j^\dagger c_{j+1} + c_{j+1}^\dagger c_j \right) \right\} - v \left(c_N^\dagger c_{N-1} + c_{N-1}^\dagger c_N \right), \quad (4.1.5)$$

$$\hat{H}' = v \left(c_0^\dagger c_{\bar{1}} + c_{\bar{1}}^\dagger c_0 + c_N^\dagger c_{N-1} + c_{N-1}^\dagger c_N \right), \quad (4.1.6)$$

em que \hat{H}_0 representa as três partes do sistema desconectadas, enquanto \hat{H}' representa as reconexões das regiões do sistema. As barras acima dos números equivalem aos índices negativos das camadas (ex: $-1 \equiv \bar{1}$) e $\varepsilon'_j = \varepsilon_j - 2v$.

4.1.1 Função de Green de superfície

Nesta secção, serão encontradas as funções de Green das semicadeias à direita (r) e à esquerda (l) e as suas respectivas densidades. Como foi dito no início deste capítulo, cada semicadeia infinita de átomos pode ser representada por um reservatório. Será utilizada na obtenção das funções de Green a simetria existente nas semicadeias infinitas.

A partir de agora, os supra-índices r das próximas funções de Green retardadas serão suprimidos e a notação da função de Green não perturbada será mudada de G_0 para g .

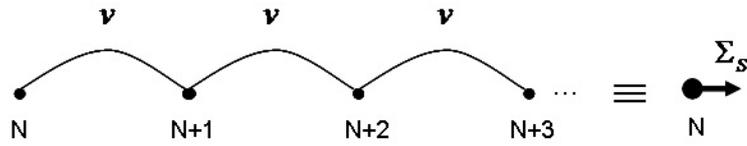


Figura 4.2: Representação de uma semicadeia.

Cada semi-cadeia infinita de átomos do sistema pode ser representada por uma superfície (S) de contato, como mostra a figura (4.2), no qual Σ_S é a auto-energia de superfície. A função de Green retardada dessa superfície de contato é dada pela equação de Dyson ,

$$G_S = g + g\Sigma_S G_S. \quad (4.1.7)$$

Considerando-se a semi-cadeia à direita da heteroestrutura de dupla barreira (HDB), é possível verificar que: $G_S = G_r$, $\Sigma_S = \Sigma_r$ (o subíndice r agora representa a semi-cadeia à direita) e g é a função de Green não perturbada de um corpo em um sítio 0, dado por:

$$g = \frac{1}{\omega - \varepsilon'_0 + i\eta}, \quad (4.1.8)$$

na qual η é uma variável infinitesimal e $\varepsilon'_0 = -U - 2v$. Multiplicando-se a expressão (4.1.7) por G_r^{-1} e por g^{-1} , obtém-se:

$$G_r^{-1} = g^{-1} - \Sigma_r. \quad (4.1.9)$$

Substituindo-se a relação (4.1.8) na equação (4.1.9), obtém-se, após uma inversão:

$$G_r = \frac{1}{\omega - \varepsilon'_0 + i\eta - \Sigma_r} \quad (4.1.10)$$

Para o cálculo da auto-energia de superfície à direita (Σ_r), o sítio de um corpo em $j = 0$ será ligado, via ‘hopping’, a uma superfície de contato em $j = 1$, cujo resultado fornecerá uma nova superfície de contato (G_r), como mostra o diagrama da figura (4.3).

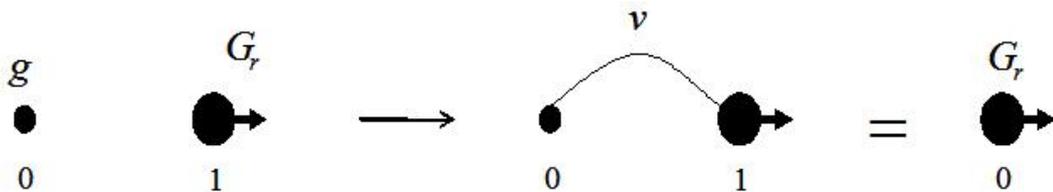


Figura 4.3: Diagrama para o cálculo da função de Green de Superfície.

Em termos da representação matricial da equação de Dyson no equilíbrio, temos as seguinte

relação para matriz 2×2 da função de Green retardada:

$$\mathbf{G} = \mathbf{g} + \mathbf{g}\Sigma\mathbf{G}, \quad (4.1.11)$$

sabendo-se que a interação é a de um corpo,

$$\Sigma = \mathbf{V} = \begin{bmatrix} 0 & v \\ v & 0 \end{bmatrix}, \quad (4.1.12)$$

e que

$$\mathbf{g} = \begin{bmatrix} g & 0 \\ 0 & G_r \end{bmatrix}, \quad (4.1.13)$$

os seguintes elementos da matriz são obtidos:

$$G_{00} = g + gvG_{10}, \quad (4.1.14)$$

$$G_{10} = G_r v G_{00}, \quad (4.1.15)$$

em que $G_{00} = G_r$ e G_{10} é uma função de Green retardada que descreve a propagação do elétron entre os sítios $j = 1$ e $j = 0$. Substituindo-se a equação (4.1.15) na relação (4.1.14), obtém-se:

$$G_r = g(1 + vG_r v G_r). \quad (4.1.16)$$

Fazendo-se a multiplicação da expressão (4.1.16) por g^{-1} e por G_r^{-1} seguida da utilização da equação (4.1.9), encontra-se na seguinte equação de segundo grau para a auto-energia de superfície,

$$\Sigma_r^2 - g^{-1}\Sigma_r + v^2 = 0. \quad (4.1.17)$$

A partir da solução da equação acima, obtém-se a relação da auto-energia da semicadeia à direita para uma dada energia ω ,

$$\Sigma_r = \frac{1}{2} (\omega + i\eta - \varepsilon'_0) \pm \frac{1}{2} \sqrt{(\omega + i\eta - \varepsilon'_0)^2 - 4v^2}, \quad (4.1.18)$$

em que $\varepsilon'_0 = -U - 2v$. Consequentemente, pode-se obter a expressão para a função de Green de superfície à direita:

$$G_r = \frac{1}{2v^2} (\omega + i\eta - \varepsilon'_0) \pm \frac{1}{2v^2} \sqrt{(\omega + i\eta - \varepsilon'_0)^2 - 4v^2}. \quad (4.1.19)$$

Para as energias em que $|\omega - \varepsilon'_0| < 2v$, a relação (4.1.19) se torna:

$$G_r = \frac{1}{2v^2} (\omega + i\eta - \varepsilon'_0) \pm \frac{i}{2v^2} \sqrt{4v^2 - (\omega + i\eta - \varepsilon'_0)^2}. \quad (4.1.20)$$

Para que a densidade de estados seja positiva, será desconsiderada a relação de soma da expressão (4.1.20). Assim, encontra-se a função de densidade de estado [58] da semicadeia à direita para uma dada energia ω :

$$\rho_r = -2 \operatorname{Im} G_r = \frac{1}{v^2} \sqrt{4v^2 - (\omega - \varepsilon'_0)^2}, \quad (4.1.21)$$

em que $|\omega - \varepsilon'_0| < 2v$.

As relações da auto-energia (Σ_l), da função de Green (G_l) e consequentemente da densidade de estado (ρ_l) para semicadeia à esquerda são similares às relações da semicadeia à direita, contudo, $\varepsilon'_0 = -2v$.

4.1.2 Dizimação da dupla barreira

Nesta secção, serão encontrados os N estados do poço de potencial infinito que se forma após aos cortes entre as regiões de espalhamento e as regiões emissora e coletora. Assim, os N sítios da região de espalhamento se transformam em N estados, através da resolução da equação de auto-valores de um poço infinito. Após a obtenção desses estados, reconecta-se via ‘hopping’ cada região de corte. Através de um processo conhecido como dizimação, ocorrerá uma redução na representação dos N estados mais duas semicadeias infinitas em dois planos conectados e renormalizados. O perfil de um poço infinito não retangular da região espalhadora separada das semicadeias da esquerda e da direita é mostrado na figura (4.4). Nesta região encontra-se a seguinte representação matricial proveniente da relação (4.1.5):

$$\hat{H}_s = \begin{bmatrix} \varepsilon'_0 & v & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ v & \varepsilon'_1 & v & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & v & \varepsilon'_2 & v & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \cdots & \cdots & 0 & v & \varepsilon'_{N-1} \end{bmatrix}. \quad (4.1.22)$$

A matriz tridiagonal \hat{H}_s , de ordem N , corresponde à região de espalhamento, expressada na base dos sítios originais. Através da diagonalização de \hat{H}_s , obtém-se uma base nova de autovetores

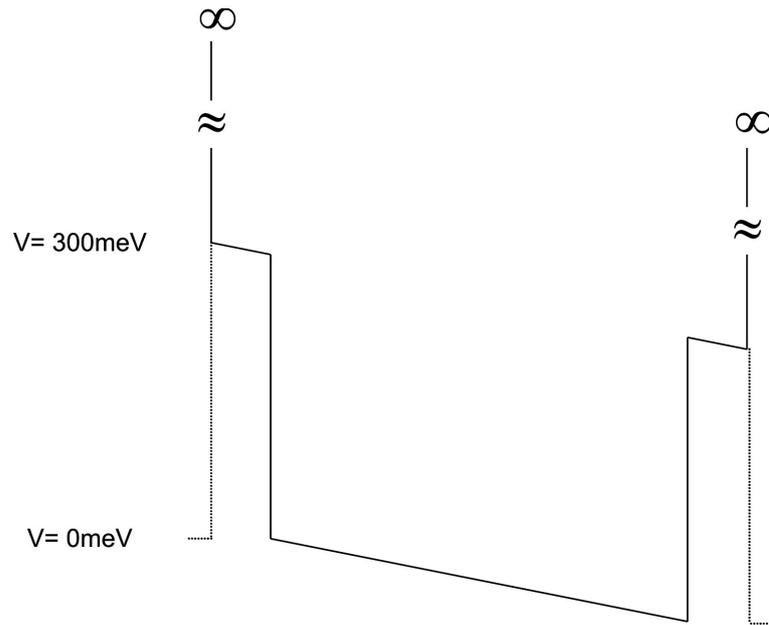


Figura 4.4: Perfil da região de dispersão.

$|m\rangle$ e os correspondentes autovalores E_m , representada pela equação,

$$\hat{H}_s|m\rangle = E_m|m\rangle, \quad (4.1.23)$$

na qual

$$|m\rangle = \sum_{j=0}^N u_{mj}|j\rangle, \quad (4.1.24)$$

e u_{mj} são as coordenadas dos autovetores $|m\rangle$ em relação a base ‘antiga’ $|j\rangle$ (base de Wannier). Obtêm-se desta forma N níveis discretos os quais terão a seguinte representação $m = 0', 1', 2', 3' \dots N-1$. Desta forma, os índices dos planos das semicadeias à direita serão mudados de $N, N+1, N+2, \dots$ para $1, 2, \dots$, enquanto os índices dos planos à esquerda continuam sendo os mesmos $\bar{1}, \bar{2}, \dots$

O potencial de conexão dos estados do poço com as semicadeias é dado pelo seguintes elementos de matriz,

$$v_{jm} = \langle j|\hat{H}'|m\rangle, \quad (4.1.25)$$

Desta forma, obtêm-se que $v_{\bar{1}m} = vu_{0m}$ e $v_{m1} = vu_{mN-1}$. Para a simplificação da notação, será deixada implícita a variável $i\eta$, encontrada nas funções de Green anteriormente (ex. eq.(4.1.8)). Com o cálculo das auto-energias da dupla barreira, as seguintes funções de Green não pertur-

badas de um corpo na a região de espalhamento são encontradas:

$$g_m = \frac{1}{\omega - E_m} \quad (4.1.26)$$

As funções de Green das semicadeias à esquerdas e à direita encontradas anteriormente serão, a partir de agora, representadas por duas superfícies localizadas em $j = \bar{1}$ e em $j = 1$. Dessa forma, obtêm-se:

$$g_{\bar{1}} = G_l = \frac{1}{\omega - \varepsilon'_{\bar{1}} - \Sigma_l}, \quad (4.1.27)$$

$$g_1 = G_r = \frac{1}{\omega - \varepsilon'_1 - \Sigma_r}, \quad (4.1.28)$$

em que $\varepsilon'_{\bar{1}} = -2v$ e $\varepsilon'_1 = U - 2v$.

Reconectando-se, através do hamiltoniano H' , a região de espalhamento às semicadeias, as seguintes relações a partir da equação de Dyson são encontradas:

$$G_{\bar{1}\bar{1}} = g_{\bar{1}} + g_{\bar{1}} \sum_m v_{\bar{1},m} G_{m\bar{1}}, \quad (4.1.29)$$

$$G_{11} = g_1 + g_1 \sum_m v_{1,m} G_{m1}, \quad (4.1.30)$$

$$G_{mj} = g_{mm}(v_{m\bar{1}} G_{\bar{1}j} + v_{m1} G_{1j}) \quad \text{em que } j = \bar{1}, 1. \quad (4.1.31)$$

Esta reconexão pode ser representada pelo diagrama da figura (4.5). Substituindo-se a relação

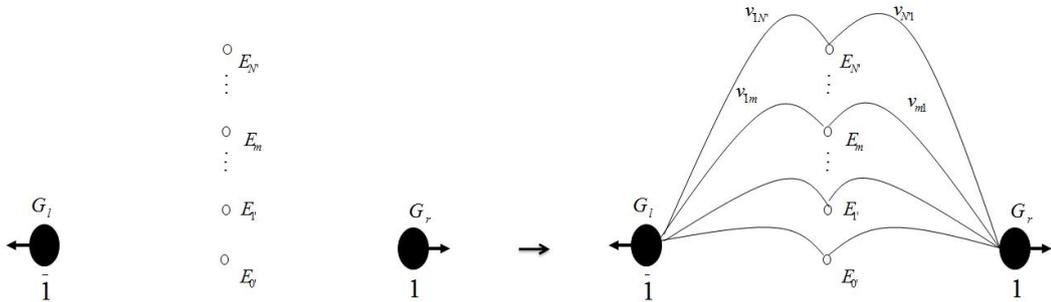


Figura 4.5: Representação da reconexão da região de espalhamento com as semicadeias à direita e à esquerda.

(4.1.31) para $j = \bar{1}$ na eq. (4.1.29) e para $j = 1$ na eq. (4.1.30), obtêm-se:

$$G_{\bar{1}\bar{1}} = g_{\bar{1}} + g_{\bar{1}} \tilde{v}_{\bar{1}\bar{1}} G_{\bar{1}\bar{1}} + g_{\bar{1}} \Sigma_{\bar{1}} G_{\bar{1}\bar{1}}, \quad (4.1.32)$$

$$G_{11} = g_1 + g_1 \tilde{v}_{1\bar{1}} G_{\bar{1}1} + g_1 \Sigma_1 G_{11}, \quad (4.1.33)$$

em que

$$\Sigma_j = \sum_m v_{jm} g_m v_{mj}, \quad \text{para } j = \bar{1}, 1 \quad (4.1.34)$$

$$\tilde{v}_{\bar{1}1} = \tilde{v}_{1\bar{1}} = \sum_m v_{\bar{1}m} g_m v_{m1}. \quad (4.1.35)$$

Simplificando-se as equações (4.1.32) e (4.1.33), obtêm-se:

$$G_{\bar{1}\bar{1}} = \tilde{g}_{\bar{1}} + \tilde{g}_{\bar{1}} \tilde{v}_{\bar{1}\bar{1}} G_{\bar{1}\bar{1}}, \quad (4.1.36)$$

$$G_{11} = \tilde{g}_1 + \tilde{g}_1 \tilde{v}_{11} G_{11}, \quad (4.1.37)$$

nas quais

$$\tilde{g}_{\bar{1}} = \frac{1}{\omega - \varepsilon'_{\bar{1}} - \Sigma_l - \Sigma_{\bar{1}}}, \quad (4.1.38)$$

$$\tilde{g}_1 = \frac{1}{\omega - \varepsilon'_1 - \Sigma_r - \Sigma_1}, \quad (4.1.39)$$

são as funções de Green não perturbadas dos sítios renormalizados $\bar{1}$ e 1. Das relações resultantes (4.1.36) e (4.1.37), observa-se que estas independem explicitamente dos N termos dos auto-estados. Este método de retro-substituição e simplificação dos termos da equação de Dyson são conhecidos como processo de dizimação. Para completar o cálculo, será encontrado, através da dizimação, os termos não diagonais de \mathbf{G} .

Da equação de Dyson, encontra-se:

$$G_{\bar{1}1} = g_{\bar{1}} \sum_m v_{\bar{1}m} G_{m\bar{1}}. \quad (4.1.40)$$

Substituindo-se a relação (4.1.31) em (4.1.40), para $j = 1$, encontra-se:

$$G_{\bar{1}1} = g_{\bar{1}} \Sigma_{\bar{1}} G_{\bar{1}1} + g_{\bar{1}} \tilde{v}_{\bar{1}1} G_{11}, \quad (4.1.41)$$

através da simplificação, obtém-se:

$$G_{\bar{1}1} = \tilde{g}_{\bar{1}} \tilde{v}_{\bar{1}1} G_{11}. \quad (4.1.42)$$

Analogamente, encontra-se

$$G_{\bar{1}\bar{1}} = \tilde{g}_1 \tilde{v}_{\bar{1}\bar{1}} G_{\bar{1}\bar{1}}. \quad (4.1.43)$$

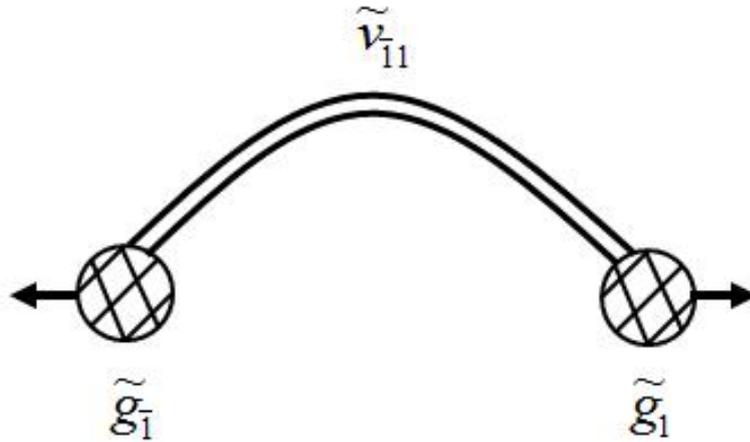


Figura 4.6: Representação do sistema renormalizado.

As equações (4.1.36), (4.1.37), (4.1.42) e (4.1.43) correspondem às duas superfícies renormalizadas em contato, representadas pelo diagrama da figura (4.6). Através de uma nova dizimação é possível reduzir estas duas superfícies a uma única que representaria todo o sistema HDB. Contudo para os cálculos de transporte somente é necessário encontrar a função de Green retardada que descreve a propagação entre as superfícies renormalizadas $\bar{1}$ e 1, i.e., $G_{\bar{1}1}$. Para isso, a representação matricial de Dyson das superfícies é utilizada:

$$\mathbf{G} = \tilde{\mathbf{g}} + \tilde{\mathbf{g}}\tilde{\mathbf{v}}\mathbf{G}, \quad (4.1.44)$$

em que

$$\tilde{\mathbf{g}} = \begin{bmatrix} \tilde{g}_{\bar{1}} & 0 \\ 0 & \tilde{g}_1 \end{bmatrix} \quad (4.1.45)$$

e

$$\tilde{\mathbf{v}} = \begin{bmatrix} 0 & \tilde{v}_{\bar{1}1} \\ \tilde{v}_{\bar{1}\bar{1}} & 0 \end{bmatrix}. \quad (4.1.46)$$

Multiplicando-se à esquerda da eq. (4.1.44) por $\tilde{\mathbf{g}}^{-1}$ e à direita por \mathbf{G}^{-1} , obtém-se a seguinte

relação para \mathbf{G}^{-1} ,

$$\mathbf{G}^{-1} = \tilde{\mathbf{g}}^{-1} - \tilde{\mathbf{v}}. \quad (4.1.47)$$

Assim, utilizando-se as expressões (4.1.38) e (4.1.39), encontra-se:

$$\mathbf{G}^{-1} = \begin{bmatrix} \omega - \varepsilon'_1 - \Sigma_l - \Sigma_{\bar{1}} & -\tilde{v}_{\bar{1}1} \\ -\tilde{v}_{\bar{1}1} & \omega - \varepsilon'_1 - \Sigma_r - \Sigma_1 \end{bmatrix}. \quad (4.1.48)$$

Essa matriz é fácil de ser invertida. Sabendo-se que \mathbf{G}^{-1} é simétrica, por indução, obtém-se que \mathbf{G} também é simétrica. Assim, a seguinte relação para $G_{\bar{1}1}$ é obtida:

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

em que

$$\Delta = (\omega - \varepsilon'_1 - \Sigma_l - \Sigma_{\bar{1}}) (\omega - \varepsilon'_1 - \Sigma_r - \Sigma_1) - \tilde{v}_{\bar{1}1}^2. \quad (4.1.50)$$

Será visto posteriormente que $|G_{\bar{1}1}|^2$ é proporcional à transmitância dos elétrons pela HDB.

4.2 CORRENTE UNIDIMENSIONAL DEPENDENTE DA TEMPERATURA

Nesta secção, será obtida uma expressão para a corrente no sistema de HDB fora do equilíbrio utilizando-se da relação de Keldysh (3.3.50). Cada um dos termos encontrados será analisado. Lembrando-se que a corrente média foi encontrada no capítulo 2 é dada pela seguinte expressão:

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

Contudo a função menor (eq.(3.3.11)) pode ser expressa em termos de um transformada de Fourier:

$$i\langle c_i^\dagger c_j \rangle = G_{ij}^< = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} G_{ij}^<(\omega) d\omega \quad (4.2.2)$$

Consequentemente, a seguinte expressão para a corrente é encontrada:

$$\bar{I} = \frac{ev}{h} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \left[G_{j-1,j}^<(\omega) - G_{j,j-1}^<(\omega) \right]. \quad (4.2.3)$$

Considerando-se agora que a região de espalhamento da HDB seja representada pelos planos

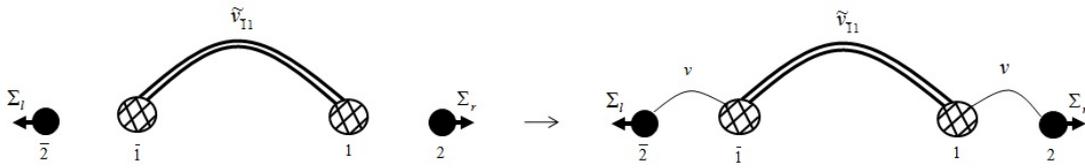


Figura 4.7: Diagrama que representa o processo de reconexão.

conectado e renormalizados $\bar{1}$ e 1, enquanto as semicadeias infinitas à esquerda e à direita sejam representadas pelos sítios $\bar{2}$ e 2. A figura (4.7) mostra a nova representação da regiões da HDB e novamente o processo de reconexão entre as mesmas. No final desta secção será mostrado que esta representação é equivalente a estudada na secção (4.1.2).

Como dito anteriormente, a corrente no estado estacionário independe do plano que está sendo medida, assim, esta será calculada entre os sítios $\bar{2}$ e $\bar{1}$. Dessa forma, obtém-se:

$$\bar{I} = \frac{ev}{h} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega [G_{\bar{2}\bar{1}}^{<}(\omega) - G_{\bar{1}\bar{2}}^{<}(\omega)], \quad (4.2.4)$$

Utilizando-se da notação reduzida em que o produto de matrizes significa uma integral sobre as quatro variáveis ($d\mathbf{r}, d\boldsymbol{\tau}$), encontram-se as seguintes equações de Dyson (3.3.22) em termos da representação de ‘tight binding’,

$$\mathbf{G} = \mathbf{g} + \mathbf{g}\Sigma\mathbf{G}, \quad (4.2.5)$$

ou

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

Lembrando-se que as integrais acima são feitas sobre o contorno C , figura (3.5).

Aplicando-se a relação de Langreth, eq.(3.3.35), nas equações (4.2.5) e (4.2.6), obtém-se as seguintes expressões:

$$\mathbf{G}^{<} = \mathbf{g}^{<} + \mathbf{g}^{<}\Sigma^a\mathbf{G}^a + \mathbf{g}^r\Sigma^r\mathbf{G}^{<} + \mathbf{g}^r\Sigma^{<}\mathbf{G}^a, \quad (4.2.7)$$

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

No processo de reconexão para o caso do tunelamento ressonante sem interações, encontram-se:

$$\Sigma^{<} = 0. \quad (4.2.9)$$

$$\mathbf{g}^< = \begin{bmatrix} g_2^< & 0 \\ 0 & g_1^< \end{bmatrix}, \quad (4.2.10)$$

$$\Sigma^a = \Sigma^r = \begin{bmatrix} 0 & v \\ v & 0 \end{bmatrix}. \quad (4.2.11)$$

Substituindo-se essas matrizes na relação (4.2.7), obtém-se a seguinte função de Green menor que descreve a propagação dos elétrons entre as camadas dos sítios $\bar{2}$ e $\bar{1}$,

$$G_{\bar{2}\bar{1}}^< = (g_2^< G_{\bar{1}\bar{1}}^a + g_2^r G_{\bar{1}\bar{1}}^<)v, \quad (4.2.12)$$

fazendo-se o mesmo na equação (4.2.8), encontra-se:

$$G_{\bar{1}\bar{2}}^< = (G_{\bar{1}\bar{1}}^< g_2^a + G_{\bar{1}\bar{1}}^r g_2^<)v. \quad (4.2.13)$$

Subtraindo-se a expressão (4.2.13) da (4.2.12), obtém-se:

$$G_{\bar{2}\bar{1}}^< - G_{\bar{1}\bar{2}}^< = v [G_{\bar{1}\bar{1}}^< (g_2^r - g_2^a) + g_2^< (G_{\bar{1}\bar{1}}^a - G_{\bar{1}\bar{1}}^r)]. \quad (4.2.14)$$

Contudo, sabe-se que:

$$g_2^r - g_2^a = g_2^> - g_2^<, \quad (4.2.15)$$

$$G_{\bar{1}\bar{1}}^r - G_{\bar{1}\bar{1}}^a = G_{\bar{1}\bar{1}}^> - G_{\bar{1}\bar{1}}^<. \quad (4.2.16)$$

Assim, a relação (4.2.14) se torna:

$$G_{\bar{2}\bar{1}}^< - G_{\bar{1}\bar{2}}^< = v [G_{\bar{1}\bar{1}}^< g_2^> - g_2^< G_{\bar{1}\bar{1}}^>]. \quad (4.2.17)$$

Da relação de Keldysh (3.3.49), obtém-se a seguinte relação para $G_{\bar{1}\bar{1}}^>$:

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

As funções de Green ‘maiores’ e ‘menores’ das semicadeias não perturbadas (i. e. antes de ocorrer a conexão do poço com as semicadeias) são dadas em termos da temperatura dos respectivos reservatórios [59],

$$g_j^<(\omega) = i n_j(\omega) \rho_j(\omega), \quad (4.2.19)$$

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

sendo $j = \bar{2}, 2$. Para $j = \bar{2}$, obtém-se: $\rho_{\bar{2}}(\omega) = \rho_l(\omega)$,

$$n_{\bar{2}}(\omega) = \frac{1}{1 + e^{\beta(\omega - E_F^l)}}$$

e para $j = 2$, $\rho_2(\omega) = \rho_r(\omega)$,

$$n_2(\omega) = \frac{1}{1 + e^{\beta(\omega - E_F^r)}}.$$

Sabendo-se que depois de estabelecidas as ligações, no estado estacionário, a distribuição de cargas não dependerá da quantidade de cargas dos sítios não perturbados internos, dados por $g_j^>$ (quantidade de buracos) e $g_j^<$ (quantidade de elétrons). Dessa forma, pode-se supor que o sítios $\bar{1}-1$, desconectados das semicadeias infinitas, estejam completamente cheios de elétrons.

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

A figura (4.7) mostra a região de espalhamento desconectada das semicadeias.

A partir da reconexão dos sistema representado pela figura (4.7), das condições (4.2.21) e da relação (4.2.18), encontra-se:

$$G_{\bar{1}\bar{1}}^> = G_{\bar{1}\bar{1}}^r V_{12} g_2^> V_{21} G_{\bar{1}\bar{1}}^a + G_{\bar{1}\bar{1}}^r V_{\bar{1}\bar{2}} g_2^> V_{\bar{2}\bar{1}} G_{\bar{1}\bar{1}}^a, \quad (4.2.22)$$

na qual

$$\begin{aligned} V_{\bar{2}\bar{1}} &= V_{\bar{1}\bar{2}} = v, \\ V_{12} &= V_{21} = v, \\ G_{\bar{1}\bar{1}}^a &= G_{\bar{1}\bar{1}}^{r*}, \\ G_{\bar{1}\bar{1}}^a &= G_{\bar{1}\bar{1}}^{r*}. \end{aligned} \quad (4.2.23)$$

Multiplicando-se a expressão (4.2.22) por $g_2^<$, obtém-se:

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

Para o cálculo de $G_{\bar{1}\bar{1}}^<$, supõe-se que:

$$g_{\bar{1}}^< = g_1^< = 0. \quad (4.2.25)$$

Assim, através dos cálculos análogos aos anteriores, encontra-se a seguinte expressão para $G_{\bar{1}\bar{1}}^< g_2^>$:

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

Utilizando-se das relações (4.2.24) e (4.2.26), obtém-se a seguinte expressão para (4.2.17),

$$G_{2\bar{1}}^< - G_{\bar{1}2}^< = v^3 |G_{\bar{1}1}^r|^2 (g_2^< g_2^> - g_2^> g_2^<). \quad (4.2.27)$$

Através das expressões (4.2.19), (4.2.20) e (4.2.27), é encontrada a seguinte relação para corrente média do sistema:

$$\bar{I} = \frac{ev^4}{h} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega |G_{\bar{1}1}^r|^2 [n_l(1 - n_r) - n_r(1 - n_l)] \rho_l(\omega) \rho_r(\omega). \quad (4.2.28)$$

Conclui-se que, utilizando-se da equação de Keldysh, é possível encontrar uma relação para a corrente no sistema de uma HDB fora do equilíbrio cujos termos estão definidos no equilíbrio. Observe-se que as quantidades de elétrons à esquerda ($n_l \rho_l$) e buracos à direita ($(1 - n_r) \rho_r$) são dadas pela multiplicação entre as densidades de estados e as distribuições de Fermi-Dirac do primeiro termo entre colchete da equação acima. A quantidades de elétrons à direita ($n_r \rho_r$) e buracos à esquerda ($(1 - n_l) \rho_l$) são dadas pela multiplicação das densidades de estados pelo segundo termo dentro do colchete. Assim o primeiro termo entre colchetes é proporcional a quantidade de elétrons efetivos que fluem da esquerda para direita, enquanto o segundo termo é proporcional a quantidade de elétrons que fluem na direção oposta ao primeiro. Na próxima secção será mostrado que o módulo ao quadrado da função de Green retardada ($|G_{\bar{1}1}^r|^2$) é proporcional à transmitância dos elétrons.

Veremos agora que a função de Green $G_{\bar{1}1}^r$, encontrada na equação da corrente (4.2.28), tem a mesma relação daquela calculada anteriormente $G_{\bar{1}1}$ (equação (4.1.42)), apesar das conexões entre sítios serem diferentes.

As funções de Green das semicadeias à esquerda, $j = \bar{2}$, e à direita, $j = 2$, representadas pela figura (4.7), são dadas por:

$$g_{\bar{2}} = \frac{1}{\omega - \varepsilon_2' - \Sigma_l}, \quad (4.2.29)$$

$$g_2 = \frac{1}{\omega - \varepsilon_2' - \Sigma_r}, \quad (4.2.30)$$

em que $\varepsilon_2' = -2v$ e $\varepsilon_2' = -2v - U$. Na região de espalhamento, entre os sítios $\bar{1}$ e 1, são encontradas as seguintes relações para as funções de Green:

$$\mathbf{g}^{-1} = \mathbf{g}_0^{-1} - \mathbf{V}, \quad (4.2.31)$$

na qual

$$\mathbf{g}_0 = \begin{bmatrix} g_1^0 & 0 \\ 0 & g_1^0 \end{bmatrix}, \quad (4.2.32)$$

$$\mathbf{V} = \begin{bmatrix} 0 & \tilde{v}_{1\bar{1}} \\ \tilde{v}_{1\bar{1}} & 0 \end{bmatrix}, \quad (4.2.33)$$

$$g_1^0 = \frac{1}{\omega - \varepsilon_1' - \Sigma_{\bar{1}}}, \quad (4.2.34)$$

$$g_1^0 = \frac{1}{\omega - \varepsilon_1' - \Sigma_1}, \quad (4.2.35)$$

sendo $\varepsilon_1' = -2\nu$, $\varepsilon_1' = -2\nu - U$ e $\Sigma_{\bar{1}}$, Σ_1 , $\tilde{v}_{1\bar{1}}$ dados pelas equações (4.1.34), e (4.1.35). Através da conexão entre a região de espalhamento e as regiões das semicadeias, obtém-se a seguinte relação para as funções de Green retardadas inversas :

$$\mathbf{G}^{-1} = \begin{bmatrix} g_2^{-1} & -\nu & 0 & 0 \\ -\nu & g_1^{0-1} & \tilde{v}_{1\bar{1}} & 0 \\ 0 & -\tilde{v}_{1\bar{1}} & g_1^{0-1} & -\nu \\ 0 & 0 & -\nu & g_2^{-1} \end{bmatrix}. \quad (4.2.36)$$

O sistema de funções de Green da HDB, representado pela figura (4.7), pode ser reduzido, via dizimação, em duas superfícies renormalizadas (figura (4.6)), como foi feito na secção anterior. Da equação de Dyson, obtêm-se:

$$G_{\bar{1}\bar{1}} = g_{\bar{1}} + g_{\bar{1}}\nu G_{2\bar{1}} + g_{\bar{1}}\tilde{v}_{1\bar{1}} G_{1\bar{1}}, \quad (4.2.37)$$

$$G_{2\bar{1}} = g_2\nu G_{\bar{1}\bar{1}}. \quad (4.2.38)$$

Substituindo-se a expressão (4.2.38) na equação (4.2.37), encontra-se a seguinte relação reduzida para $G_{\bar{1}\bar{1}}$:

$$G_{\bar{1}\bar{1}} = \tilde{g}_{\bar{1}} + \tilde{g}_{\bar{1}}\tilde{v}_{1\bar{1}} G_{1\bar{1}}, \quad (4.2.39)$$

em que

$$\tilde{g}_{\bar{1}}^{-1} = g_{\bar{1}}^{-1} - \nu g_2\nu. \quad (4.2.40)$$

Contudo, sabe-se que:

$$vg_2v = \frac{v^2}{\omega + 2v - \Sigma_l} = \Sigma_l, \quad (4.2.41)$$

é a relação de autoconsistência, análoga a equação (4.1.17), cuja a solução nos permitiu obter Σ_l . Assim a função de Green renormalizada será dada por:

$$\tilde{g}_{\bar{1}} = \frac{1}{\omega - \varepsilon'_{\bar{1}} - \Sigma_{\bar{1}} - \Sigma_l}. \quad (4.2.42)$$

Analogamente, obtém-se que:

$$\tilde{g}_1 = \frac{1}{\omega - \varepsilon'_1 - \Sigma_1 - \Sigma_r}. \quad (4.2.43)$$

Estas relações são iguais àquelas calculadas anteriormente, dadas pelas equações (4.1.38) e (4.1.39). O termo não diagonal da função de Green é dado por:

$$G_{\bar{1}1} = g_{\bar{1}}\tilde{v}_{\bar{1}1}G_{11} + g_{\bar{1}}vG_{\bar{2}1}, \quad (4.2.44)$$

em que

$$G_{\bar{2}1} = g_2vG_{\bar{1}1}. \quad (4.2.45)$$

Substituindo (4.2.45) em (4.2.44), encontra-se:

$$G_{\bar{1}1} = \tilde{g}_{\bar{1}}\tilde{v}_{\bar{1}1}G_{11}. \quad (4.2.46)$$

Esta relação é igual a relação (4.1.42). Desta forma a expressão (4.1.49) da função de Green $G_{\bar{1}1}$ é utilizada para o cálculo da corrente.

4.3 RELAÇÃO DA FUNÇÃO DE GREEN COM A TRANSMITÂNCIA

Um tratamento análogo aos cálculos anteriores pode ser feito através das funções de onda. Nesta secção, será mostrado que a função de Green $G_{\bar{1}1}^r$ é proporcional à transmitância.

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

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

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:

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

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 (4.1.24). Projetando-se a relação (4.3.2) nos vetores $|i\rangle$ que são ortogonais entre si e aos vetores $|m\rangle$, obtém-se:

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

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

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

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:

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

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:

$$va_{\bar{2}} + (\varepsilon'_1 - \omega)a_{\bar{1}} + \sum_m v_{\bar{1}m} b_m = 0, \quad (4.3.8)$$

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

$$\sum_m v_{m1} b_m + (\varepsilon'_1 - \omega)a_1 + va_2 = 0. \quad (4.3.10)$$

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:

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

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 ms 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:

$$v a_2 + (\varepsilon'_{\bar{1}} + \Sigma_{\bar{1}} - \omega) a_{\bar{1}} + \tilde{v}_{\bar{1}1} a_1 = 0, \quad (4.3.15)$$

$$\tilde{v}_{1\bar{1}} a_{\bar{1}} + (\varepsilon'_1 + \Sigma_1 - \omega) a_1 + v a_2 = 0. \quad (4.3.16)$$

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 de onda transmitido na direção z , o qual satisfaz a seguinte relação de dispersão:

$$\omega - \varepsilon'_1 = 2v \cos k'_z a, \quad (4.3.18)$$

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:

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

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

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

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

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

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

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

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

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:

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

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

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

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

$$a_{\bar{1}} = -\frac{1}{\tilde{v}_{\bar{1}1}} (\varepsilon'_1 + \Sigma_1 + \Sigma_r - \omega) A_T. \quad (4.3.28)$$

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

$$va_2 + (\varepsilon'_1 + \Sigma_l - \omega) \left[-\frac{1}{\tilde{v}_{11}} (\varepsilon'_1 + \Sigma_1 + \Sigma_r - \omega) \right] A_T + \tilde{v}_{11} A_T = 0. \quad (4.3.29)$$

Através desta relação é possível encontrar a_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):

$$e^{ik_z a} a_{\bar{1}} - a_2 = A_I (e^{ik_z a} - e^{-ik_z a}),$$

ou

$$A_I = \frac{ve^{ik_z a} a_{\bar{1}} - va_2}{2iv \sin k_z a}. \quad (4.3.36)$$

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

$$ve^{ik_z a} a_{\bar{1}} - va_2 = (\varepsilon'_1 - \omega + \Sigma_{\bar{1}} + \Sigma_l) a_{\bar{1}} + \tilde{v}_{11} a_1. \quad (4.3.37)$$

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

$$ve^{ik_z a} a_{\bar{1}} - va_2 = -\frac{1}{\tilde{v}_{11}} [(\varepsilon'_1 - \omega + \Sigma_{\bar{1}} + \Sigma_l)(\varepsilon'_1 + \Sigma_1 + \Sigma_r - \omega) - \tilde{v}_{11}^2] A_T. \quad (4.3.38)$$

Observe-se que a relação entre o colchete da eq. (4.3.38) é o determinante da matriz (4.1.48), isto é, o delta (Δ) da relação (4.1.50), Dessa forma encontra-se:

$$ve^{ik_z a} a_{\bar{1}} - va_2 = -\frac{\Delta}{\tilde{v}_{\bar{1}1}} A_T. \quad (4.3.39)$$

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

$$A_I = -\frac{\Delta}{2iv\tilde{v}_{\bar{1}1} \sin k_z a} A_T. \quad (4.3.40)$$

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

$$t = \frac{A_T}{A_I} = 2iv \sin k_z a \left(\frac{-\tilde{v}_{\bar{1}1}}{\Delta} \right). \quad (4.3.41)$$

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),

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

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. A variável 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 CÁLCULO DA CORRENTE 3D

O hamiltoniano eletrônico da HDB com a dependência explícita do vetor de onda paralelo a interface \mathbf{k} , eq.(2.1.4), pode ser representado da seguinte forma:

$$\hat{H}'_e(\mathbf{k}) = E_{\mathbf{k}} \hat{I} + \hat{H}'_e(0), \quad (4.4.1)$$

sendo

$$\hat{I} = \sum_j c_{j,\mathbf{k}}^\dagger c_{j,\mathbf{k}}, \quad (4.4.2)$$

o operador identidade para \mathbf{k} . Como o nosso sistema se encontra nas regiões em que $k_x a \ll 1$ e $k_y a \ll 1$, a seguinte aproximação é encontrada:

$$E_{\mathbf{k}} = 2v(\cos(k_x a) + \cos(k_y a) - 2) \cong \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}. \quad (4.4.3)$$

Para cada \mathbf{k} , a função de Green retardada na representação matricial é dada da seguinte forma:

$$G^r(\omega, \mathbf{k}) = \left[\omega \hat{I} - \hat{H}'_e(\mathbf{k}) \right]^{-1}. \quad (4.4.4)$$

A energia do nosso sistema pode escrita como:

$$\omega = E + \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}, \quad (4.4.5)$$

sendo E a contribuição do elétron, proveniente da direção de crescimento da dupla barreira (z), para a energia total (ω). Substituindo-se a relação (4.4.5) na (4.4.4), obtém-se:

$$\begin{aligned} G^r(\omega, \mathbf{k}) &= \left[\left(E + \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \right) \hat{I} - \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \hat{I} - \hat{H}'_e(0) \right]^{-1} \\ &= \left[E \hat{I} - \hat{H}'_e(0) \right]^{-1} = G^r(E). \end{aligned} \quad (4.4.6)$$

Dessa forma, dado um certo \mathbf{k} , obtém-se as seguintes igualdades para cada termo da eq. (4.2.28),

$$G_{11}^r(\omega, \mathbf{k}) = G_{11}^r(E),$$

$$\rho_l(\omega, \mathbf{k}) = -2 \text{Im} G_l^r(\omega, \mathbf{k}) = -2 \text{Im} G_l^r(E) = \rho_l(E), \quad (4.4.7)$$

$$\rho_r(\omega, \mathbf{k}) = \rho_r(E).$$

Entretanto as distribuições de Fermi-Dirac à direita e à esquerda carregam consigo a dependência em \mathbf{k} das seguintes formas:

$$n_l(\mathbf{k}) = \frac{1}{e^{\beta(E + \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - E_F^l)} + 1}, \quad (4.4.8)$$

$$n_r(\mathbf{k}) = \frac{1}{e^{\beta(E + \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - E_F^r)} + 1}, \quad (4.4.9)$$

nas quais $E_F^r = E_F^l - U$, $\beta = 1/K_b T$, K_b é a constante de Boltzmann e T é a temperatura. Aplicando-se a mudança de variável da eq. (4.4.5) na relação (4.2.28), obtém-se a seguinte corrente uni-dimensional:

$$\bar{I}(\mathbf{k}) = \frac{e}{h} v^4 \int_{-\infty}^{\infty} dE \{ |G_{\bar{1}1}^r(E)|^2 [n_l(\mathbf{k})(1 - n_r(\mathbf{k})) - n_r(\mathbf{k})(1 - n_l(\mathbf{k}))] \rho_l(E) \rho_r(E) \}. \quad (4.4.10)$$

Dentro do colchete da eq. (4.4.10), a seguinte igualdade é encontrada

$$[n_l(1 - n_r) - n_r(1 - n_l)] = n_l - n_r. \quad (4.4.11)$$

O objetivo desta secção é calcular a corrente total (\bar{I}_T) que passa pela HDB, assim sendo, um somatório sobre todos os \mathbf{k} , na equação (4.4.10), deve ser feito:

$$\bar{I}_T = \sum_{\mathbf{k}} \bar{I}(\mathbf{k}). \quad (4.4.12)$$

No limite do contínuo, o somatório sobre \mathbf{k} pode-se transformar numa integral:

$$\sum_{\mathbf{k}} \rightarrow \frac{S}{(2\pi)^2} \int_0^{\infty} d\mathbf{k},$$

portanto

$$\bar{I}_T = \frac{eSv^4}{h(2\pi)^2} \int_0^{\infty} d\mathbf{k} \int_{-\infty}^{\infty} dE \{ |G_{\bar{1}1}^r(E)|^2 [n_l(\mathbf{k}) - n_r(\mathbf{k})] \rho_l(E) \rho_r(E) \}. \quad (4.4.13)$$

Integrando-se analiticamente esta última em relação a \mathbf{k} (veja no Apêndice A.1), obtém-se o seguinte resultado para corrente total \bar{I}_T

$$\bar{I}_T = \frac{2\pi e v^4 S m^*}{h^3 \beta} \int_{-\infty}^{\infty} dE |G_{\bar{1}1}^r(E)|^2 \rho_l(E) \rho_r(E) F(E), \quad (4.4.14)$$

em que:

$$F(E) = \left\{ \ln \left[1 + e^{\beta(E_F^l - E)} \right] - \ln \left[1 + e^{\beta(E_F^r - E)} \right] \right\}. \quad (4.4.15)$$

A integral da eq. (4.4.14) em relação a variável E foi feita utilizando-se de métodos computacionais.

4.5 RESULTADOS

Nesta secção, serão mostrados os resultados dos cálculos computacionais feitos para corrente em uma HDB sem interação elétron-fônon. A figura (4.8) mostra o potencial da HDB

considerada que possui uma configuração de ressonância com 20 camadas de AlGaAs nas barreiras e 70 camadas de GaAs no fundo do poço a um potencial externo de $U=70$ mV. Essa configuração faz com que a diferença entre as energias dos picos ressonantes do estado fundamental e do primeiro estado excitado fiquem próxima da energia do fônon LO do GaAs ($\hbar\omega_{LO} = 36,6$ meV).

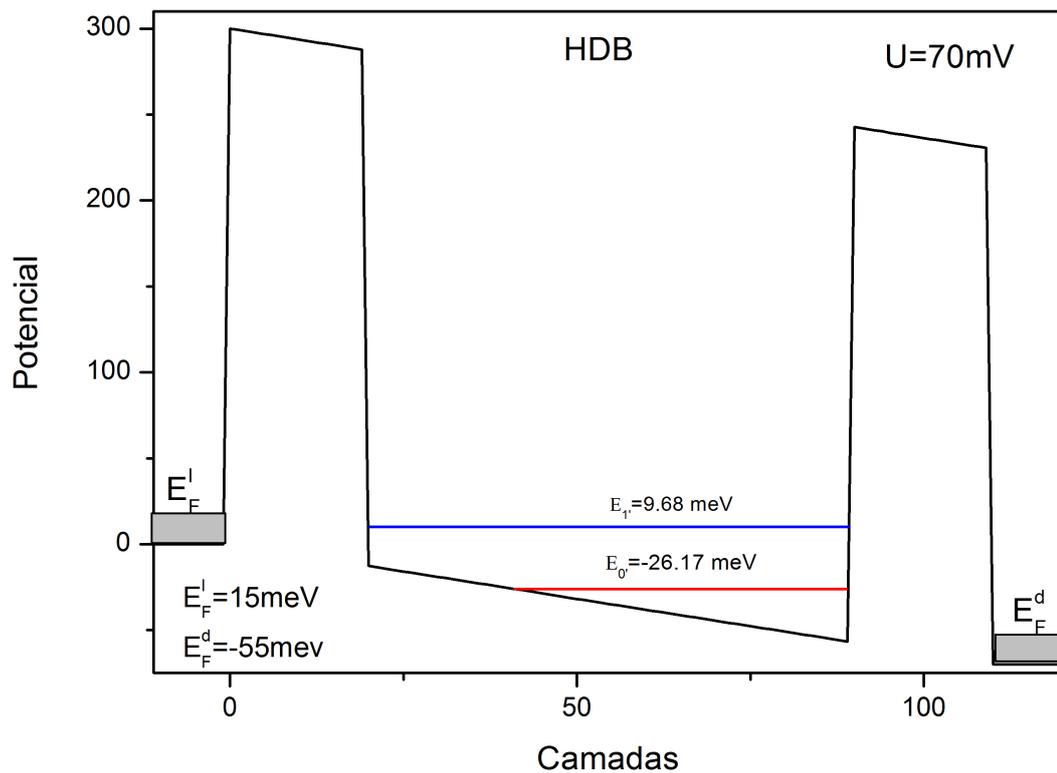


Figura 4.8: Representação do perfil de potencial da HDB.

Na figura (4.9), pode ser visto o comportamento da corrente em função do potencial aplicado a uma temperatura $T = 25K$. O primeiro pico de corrente (entre 0 mV à 22 mV) corresponde ao fluxo dos elétrons que tunelam pela dupla barreira através do pico de energia do estado fundamental, enquanto o segundo pico (entre 40 mV à 90 mV) de corrente está relacionado ao fluxo elétrons que tunelam pelo estado excitado sem interagir com os fônons.

Variando-se a temperatura da HDB em $T= 0K, 5K$ e $25K$, pode-se ver, no gráfico da figura (4.10), que o início da corrente proveniente do pico excitado diminui a medida em que a temperatura aumenta. Isto ocorre pois os elétrons do emissor, localizados perto do potencial químico, se excitam para estados acima da energia de Fermi com o aumento da temperatura, logo, a

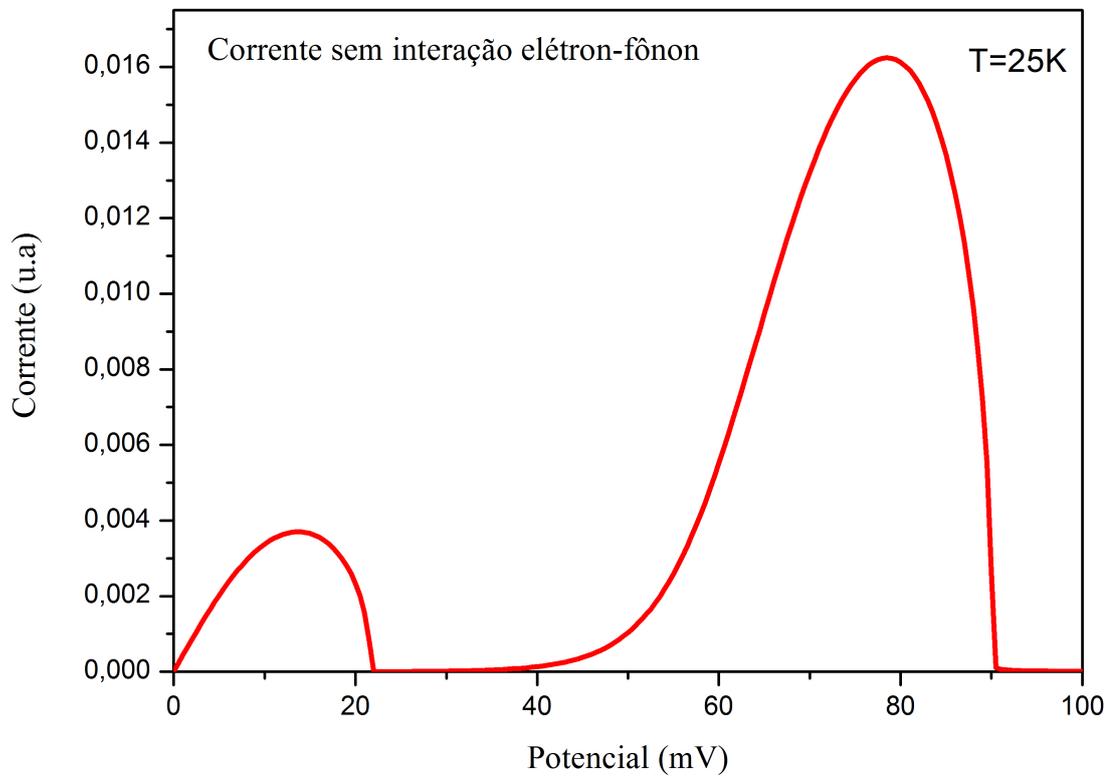


Figura 4.9: Corrente de elétrons em função do potencial aplicado a uma temperatura $T=25K$.

corrente começa a fluir em potenciais menores a medida que a temperatura aumenta.

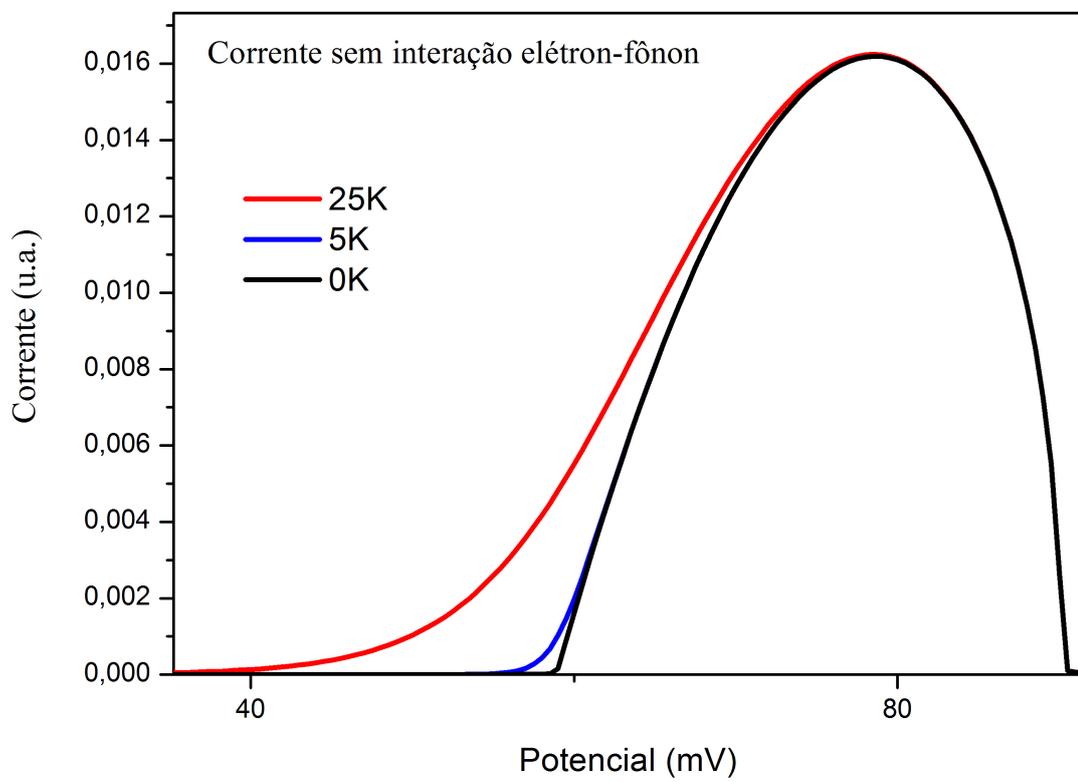


Figura 4.10: Corrente proveniente do pico excitado para as temperaturas $T= 0\text{K}$, 5K e 25K .

5 TRANSPORTE COM INTERAÇÃO ELÉTRON-FÔNON

5.1 INTRODUÇÃO

Nesta secção será descrita a interação entre elétrons e fônons. Esta interação é importante no que se refere às teorias de muitos corpos [51]. Os principais efeitos do acoplamento entre elétrons e fônons são [60] :

- a) O espalhamento dos elétrons de um estado \mathbf{k}_e para um estado \mathbf{k}'_e gera uma resistência elétrica.
- b) Absorção de fônons: a interação entre elétrons e fônons é uma fonte de atenuação de ondas ultra-sônicas em metais.
- c) Interação atrativa entre elétrons: importante em supercondutividade e resultante da emissão virtual de fônons.
- d) Polaron: o elétron irá sempre carregar consigo o campo de polarização da rede. A partícula composta (quase partícula), elétron mais campo de fônons longitudinais ópticos (LO) é chamada polaron. Este tem uma massa efetiva maior que a do elétron numa rede não perturbada. A interação em questão é uma interação coulombiana de longo alcance.

O foco deste trabalho está em um acoplamento forte entre elétrons e fônons. Isso acontece em sistemas baseados em sólidos polares com átomos distintos, nos quais prevalecem as interações com as vibrações LO. A vibração LO comprime ou expande a rede em vários pontos, alterando-se o potencial eletrostático efetivo que atua sobre o elétron (campos dipolares oscilantes), dessa forma, o mesmo é espalhado [61].

Os sólidos polares são formados por uma base com dois átomos que podem ser iguais ou diferentes. No primeiro caso existe a possibilidade de acoplamento de elétrons com fônons TO [62]. No segundo, o acoplamento significativo se dá com os fônons LO, formando os polarons.

5.1.1 O Hamiltoniano de Fröhlich

A descrição da interação elétron-fônon, aplicada ao problema do polaron, é feita pelo hamiltoniano de Fröhlich [63], que estudou esse tipo de interação em 1950 e cuja a derivação está muito bem implementada no livro de Haken [64]. Este hamiltoniano é escrito com base no formalismo de segunda quantização e tem como ponto de partida em sua dedução a interação clássica entre um dipolo elétrico, formado por um par ânion-cátion e o campo-elétrico produzido pelo elétron de condução. Em seguida passa-se para o contínuo a distribuição de carga, posições e polarização. Apenas as ondas longitudinais de polarização (LO) contribuem para a interação elétron-fônon.

O hamiltoniano total \hat{H}_{tot} para interação elétron-fônon deve incluir na análise da dinâmica do sistema um termo que leve em consideração a parte eletrônica e outro para a parte iônica (rede). Numa aproximação de ordem zero de perturbação para o hamiltoniano, as soluções para os elétrons e fônons são ondas planas com vetores de onda \mathbf{k}_e e \mathbf{q} respectivamente. O termo de interação acopla estes modos. Mostra-se na referência [64] que:

$$\hat{H}_{tot} = \hat{H}_{el} + \hat{H}_{ph} + \hat{H}_{el-ph}, \quad (5.1.1)$$

sendo

$$\hat{H}_{el} = \sum_{\mathbf{k}_e} \frac{\hbar^2 k_e^2}{2m^*} c_{\mathbf{k}_e}^\dagger c_{\mathbf{k}_e}, \quad (5.1.2)$$

$$\hat{H}_{ph} = \sum_{\mathbf{q}} \hbar \omega_{\mathbf{q}} b_{\mathbf{q}}^\dagger b_{\mathbf{q}} \quad (5.1.3)$$

$$\hat{H}_{el-ph} = \hbar \sum_{\mathbf{q}, \mathbf{k}_e} \left(\gamma_{\mathbf{q}} b_{\mathbf{q}} c_{\mathbf{k}_e+\mathbf{q}}^\dagger c_{\mathbf{k}_e} + \gamma_{\mathbf{q}}^* b_{\mathbf{q}}^\dagger c_{\mathbf{k}_e-\mathbf{q}}^\dagger c_{\mathbf{k}_e} \right), \quad (5.1.4)$$

em que $b_{\mathbf{q}}^\dagger$ e $b_{\mathbf{q}}$ são os operadores de criação e de destruição de fônons LO com momento \mathbf{q} , $\omega_{\mathbf{q}}$ é a frequência de vibração da rede, m^* é a massa efetiva do elétron no semiconductor e $\gamma_{\mathbf{q}}$ é a constante de acoplamento da interação elétron-fônon dada neste momento por:

$$\hbar \gamma_{\mathbf{q}} = -4\pi i \left\{ \frac{e^2 \hbar}{2\alpha \omega_{\mathbf{q}} V} \right\} \frac{1}{q}. \quad (5.1.5)$$

O parâmetro α é expresso como:

$$\alpha = \frac{4\pi}{\omega_{\mathbf{q}}^2} \left(\frac{1}{\epsilon_\infty} - \frac{1}{\epsilon} \right)^{-1} = \frac{4\pi}{\omega_{\mathbf{q}}^2} \left(\frac{1}{\epsilon^*} \right), \quad (5.1.6)$$

sendo V volume do semiconductor, ε a constante dielétrica do meio a baixas frequências, ε_∞ a constante dielétrica eletrônica para altas frequências e ε^* é a constante dielétrica efetiva. No volume, dispersão quadrática para os fônons LO é dada por:

$$\omega_q^2 = \omega_0^2 - v^2 q^2. \quad (5.1.7)$$

Para o sistema de nosso interesse, GaAs, $\hbar\omega_0 = 36.6\text{meV}$

5.2 TRANSPORTE ELETRÔNICO ASSISTIDO POR FÔNONS EM UMA HDB

Depois dos trabalhos de Goldman, Tsui e Cunningham [7, 6] ficou evidente a necessidade e a importância de se levar em conta a interação elétron-fônon e a interação elétron-elétron nos estudos das propriedades eletrônicas nos dispositivos baseados em heteroestruturas de dupla barreira. No sistema estudado aqui, a interação elétron-fônon é responsável pela emissão (ou absorção) do fônon longitudinal óptico do GaAs (LO_0) o qual por sua vez decai em um outro par de fônons LO_1 e TA. Este decaimento dos fônons LO_0 foi demonstrado por Vallée e Bogani [65]. A interação elétron-elétron é responsável por fenômenos não lineares observados experimentalmente, tais como a biestabilidade e a instabilidade. Dessa forma, será introduzido nos cálculos de transporte as contribuições provenientes das interações elétron-fônon e elétron-elétron na HDB e a partir desta será analisado o comportamento da corrente.

5.2.1 O hamiltoniano total do sistema

O hamiltoniano total do sistema é dado por

$$\hat{H}_{tot} = \hat{H}_e + \hat{H}_f + \hat{H}_{e-f} + \hat{H}_{e-e}, \quad (5.2.1)$$

no qual \hat{H}_e é o hamiltoniano que descreve os elétrons, igual ao calculado no capítulo anterior:

$$\begin{aligned} \hat{H}_e = & \sum_{\mathbf{k}, j \neq 0} \left\{ \varepsilon'_{\mathbf{k}j} c_{j\mathbf{k}}^\dagger c_{j\mathbf{k}} + v \left(c_{j\mathbf{k}}^\dagger c_{j-1\mathbf{k}} + c_{j-1\mathbf{k}}^\dagger c_{j\mathbf{k}} \right) \right\} + \sum_{m\mathbf{k}} E_{m\mathbf{k}} c_{m-1\mathbf{k}}^\dagger c_{m\mathbf{k}} \\ & + \sum_{m\mathbf{k}} \left\{ v_{m\bar{1}} \left(c_{m\mathbf{k}}^\dagger c_{\bar{1}\mathbf{k}} + c_{\bar{1}\mathbf{k}}^\dagger c_{m\mathbf{k}} \right) + v_{m1} \left(c_{m\mathbf{k}}^\dagger c_{1\mathbf{k}} + c_{1\mathbf{k}}^\dagger c_{m\mathbf{k}} \right) \right\}, \end{aligned} \quad (5.2.2)$$

sendo $E_{m\mathbf{k}} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} + E_m$, e E_m as energias dadas pela equação (4.1.23).

O Hamiltoniano para os fônons é dado por,

$$\hat{H}_{ph} = \hat{H}_{LO_0} + \hat{H}_{LO_1} + \hat{H}_{TA}, \quad (5.2.3)$$

$$\hat{H}_{LO_0} = \sum_{\mathbf{q}_0} \hbar \omega_0 b_{\mathbf{q}_0}^\dagger b_{\mathbf{q}_0}, \quad (5.2.4)$$

$$\hat{H}_{LO_1} = \sum_{\mathbf{q}_1} (\hbar \omega_1 - i \hbar \kappa_1) b_{\mathbf{q}_1}^\dagger b_{\mathbf{q}_1}, \quad (5.2.5)$$

$$\hat{H}_{TA} = \sum_{\mathbf{q}_2} \hbar \omega_2 b_{\mathbf{q}_2}^\dagger b_{\mathbf{q}_2}, \quad (5.2.6)$$

nos quais $\hbar \omega_0$, $\hbar \omega_1$, $\hbar \omega_2$ são as energias dos fônons LO_0 , LO_1 e TA respectivamente e $b_{\mathbf{q}_j}$, $b_{\mathbf{q}_j}^\dagger$ ($j = 0, 1, 2$) são os operadores criação e de aniquilação dos respectivos fônons com vetores de onda \mathbf{q}_j . Foi introduzido o termo imaginário $i \hbar \kappa_1$ que leva em conta o decaimento por anarmonicidade dos fônons \widetilde{LO} . A interação elétron-fônon é relevante apenas dentro do poço. Dessa maneira, o hamiltoniano (5.1.4) pode ser escrito da seguinte forma:

$$\hat{H}_{el-ph} = \hbar \sum_{\mathbf{q}_0 \mathbf{k}} \gamma_{\mathbf{k}' \mathbf{k} \mathbf{q}_0} \left(b_{\mathbf{q}_0} c_{0' \mathbf{k}}^\dagger c_{1' \mathbf{k}} + b_{\mathbf{q}_0}^\dagger c_{1' \mathbf{k}}^\dagger c_{0' \mathbf{k}} \right), \quad (5.2.7)$$

no qual $c_{m'}^\dagger$, $c_{m'}$, são os operadores de criação e destruição dos elétrons dos níveis do poço ($m' = 0'$ para o nível fundamental e $m' = 1'$ para o nível excitado), \mathbf{k} e \mathbf{k}' são os vetores de onda paralelos às interfaces, associados aos níveis fundamental e excitado dos elétrons respectivamente. Esses vetores respeitam a lei de conservação do momento cristalino, i. e., $\mathbf{k} = \mathbf{k}' + \mathbf{q}_0$. No dispositivo, existe simetria de translação no plano xy . Esta simetria é quebrada devido à interação elétron-fônon e é possível recuperá-la fazendo uma média sobre \mathbf{q}_0 , veja [16]. Desta forma, o hamiltoniano (5.2.7) pode ser reescrito como:

$$\hat{H}_{el-ph} = \hbar \sum_{\mathbf{k}} \gamma \left(b_{\mathbf{k}} c_{0' \mathbf{k}}^\dagger c_{1' \mathbf{k}} + b_{\mathbf{k}}^\dagger c_{1' \mathbf{k}}^\dagger c_{0' \mathbf{k}} \right) \quad (5.2.8)$$

sendo γ o parâmetro que representa o valor efetivo da interação elétron-fônon.

O hamiltoniano \hat{H}_{el-el} , que descreve a interação elétron-elétron, é tomado na aproximação de Hartree. Isto significa que as energias $E_{0'}$ e $E_{1'}$ dependem da carga acumulada no poço. O efeito da carga acumulada no poço é tratado auto-consistentemente. Essa aproximação será vista com mais detalhes no próximo capítulo.

5.2.2 Cálculo da corrente

Nesta secção será encontrada uma relação para a corrente total na HDB que leva em consideração a interação elétron-fônon no poço.

Fora da região de dispersão, a relação para corrente é igual àquela calculada na secção (2.1.1), apesar do hamiltoniano do sistema ser dado agora pela eq.(5.2.1). Assim sendo:

$$I = \frac{ev}{i\hbar}(c_j^\dagger c_{j-1} - c_{j-1}^\dagger c_j) \quad (5.2.9)$$

A dependência em \mathbf{k} é novamente deixada implícita na corrente.

Como foi dito na secção 1.3, novos canais de fluxos de elétrons são abertos a partir do momento em que ocorre a interação entre os elétrons e fônons. Dessa forma, será considerado o caso em que somente dois canais de fônons são importantes. Esses canais serão chamados de canal zero ($f = 0$), que é quando não há fônons, e canal um ($f = 1$), que é quando há uma emissão de um fônon de energia $\hbar\omega_0$. As contribuições dos outros canais, que seriam dadas pelos modos evanescentes, são iguais a zero. Assim, é encontrado a seguinte corrente média para um canal f , em termos da transformada de Fourier:

$$\bar{I}^f = \frac{ev}{h} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \left[G_{j-1,j}^{ff<}(\omega) - G_{j,j-1}^{ff<}(\omega) \right], \quad (5.2.10)$$

sendo a energia total do sistema dada por,

$$\omega = E + \frac{\hbar^2 k_{\parallel}^2}{2m^*} + f(\hbar\omega_0) = \omega' + f(\hbar\omega_0) \quad \text{para } f = 0, 1. \quad (5.2.11)$$

Logo, a corrente total média na direção (z) é dada por:

$$\bar{I} = \sum_{f=0}^1 \bar{I}^f. \quad (5.2.12)$$

Como foi feito no capítulo anterior, será calculado a corrente que passa por um dos canais f da HDB, através da conexão das semicadeias à direita e à esquerda, representadas pelos planos renormalizados $\bar{2}$ e 2 , com o poço, representado pelos planos conectados $\bar{1}$ e 1 , como é mostrado na figura (5.1).

Assim a corrente pelo canal f entre os sítios $\bar{2}$ em $\bar{1}$ é dada por:

$$\bar{I}^f = \frac{ev}{h} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' \left[G_{\bar{2}\bar{1}}^{ff<}(\omega') - G_{\bar{1}\bar{2}}^{ff<}(\omega') \right]. \quad (5.2.13)$$

Os próximos cálculos são análogos aos realizados na secção (4.2). Em termos de matrizes, são encontradas as seguintes relações para as funções de Green menor não perturbada dos sítios $\bar{1}$ e

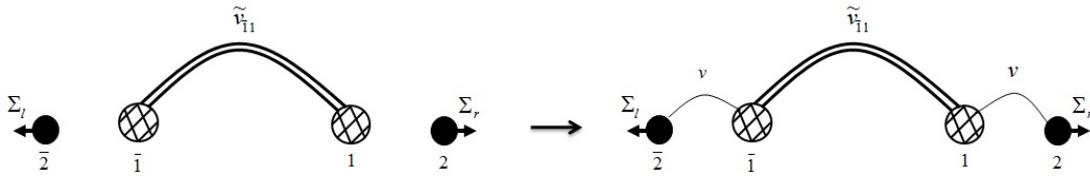


Figura 5.1: Representação do cálculo da corrente.

$\bar{2}$.

$$\tilde{\mathbf{g}}^< = \begin{bmatrix} \tilde{\mathbf{g}}^{0<} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \tilde{\mathbf{g}}^{1<} \end{bmatrix}, \quad (5.2.14)$$

em que

$$\tilde{\mathbf{g}}^{f<} = \begin{bmatrix} g_2^{f<} & 0 \\ 0 & g_1^{f<} \end{bmatrix}, \text{ para } f = 0, 1, \quad (5.2.15)$$

A interação novamente é a de um corpo, dado pelo 'hopping' dos elétrons:

$$\Sigma^a = \Sigma^r = \begin{bmatrix} \mathbf{0} & \tilde{\mathbf{V}} \\ \tilde{\mathbf{V}} & \mathbf{0} \end{bmatrix}, \quad (5.2.16)$$

$$\tilde{\mathbf{V}} = \begin{bmatrix} 0 & v \\ v & 0 \end{bmatrix}, \quad (5.2.17)$$

O tunelamento eletrônico é não interagente, então $\Sigma^< = 0$. Através das relações (4.2.7) e (4.2.8), obtêm-se as seguintes expressões:

$$G_{2\bar{1}}^{ff<} = v \left(g_2^{f<} G_{1\bar{1}}^{ff^a} + g_2^{f^r} G_{1\bar{1}}^{ff<} \right), \quad (5.2.18)$$

$$G_{1\bar{2}}^{ff<} = v \left(G_{1\bar{1}}^{ff<} g_2^{f^a} + G_{1\bar{1}}^{ff^r} g_2^{f<} \right). \quad (5.2.19)$$

Fazendo-se uma subtração dessas expressões, obtém-se:

$$G_{2\bar{1}}^{ff<} - G_{1\bar{2}}^{ff<} = v \left[G_{1\bar{1}}^{ff<} g_2^{f>} - g_2^{f<} G_{1\bar{1}}^{ff>} \right]. \quad (5.2.20)$$

Supondo-se que não existam buracos no poço, antes da reconexão, i.e.,

$$g_1^{f>} = g_1^{f>} = 0. \quad (5.2.21)$$

Conectando-se as semicadeias ao poço, mostrada na figura (5.1), obtém-se:

$$G_{11}^{ff>} = \sum_{f'=0}^1 v^2 \left[|G_{11}^{ff'r}|^2 g_2^{f'>} + |G_{11}^{ff'r}|^2 g_2^{f'>} \right], \quad (5.2.22)$$

a qual a equação de Keldysh (3.3.51) foi utilizada. Analogamente, encontra-se:

$$G_{11}^{ff<} = \sum_{f'=0}^1 v^2 \left[|G_{11}^{ff'r}|^2 g_2^{f'<} + |G_{11}^{ff'r}|^2 g_2^{f'<} \right], \quad (5.2.23)$$

sendo $f' = 0, 1$. Dessa forma, a expressão (5.2.20) torna-se:

$$G_{21}^{ff<} - G_{12}^{ff<} = v^3 \sum_{f'=0}^1 |G_{11}^{ff'r}|^2 \left[g_2^{f'<} g_2^{f'>} - g_2^{f'>} g_2^{f'<} \right]. \quad (5.2.24)$$

Lembrando-se que

$$g_j^{f'<}(\omega') = in_j(\omega') \rho_j^f(\omega'), \quad (5.2.25)$$

$$g_j^{f'>}(\omega') = i[1 - n_j(\omega)] \rho_j^f(\omega'). \quad (5.2.26)$$

sendo $n_1^f(\omega') = n_r(\omega - f(\hbar\omega_0))$, $n_1^f(\omega) = n_l(\omega - f(\hbar\omega_0))$, $\rho_1^f(\omega') = \rho_r^f(\omega - f(\hbar\omega_0))$ e $\rho_1^f = \rho_l^f(\omega - f(\hbar\omega_0))$.

Assim, a corrente unidimensional é dada por:

$$\bar{I} = \frac{ev^4}{h} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' \sum_{ff'} |G_{11}^{ff'r}(\omega')|^2 \left[n_l^f(1 - n_r^{f'}) - n_r^{f'}(1 - n_l^f) \right] \rho_l^f(\omega') \rho_r^{f'}(\omega'). \quad (5.2.27)$$

As contribuições para corrente são nulas em $f \neq 0$ e em $f' \neq 0, 1$, pois $\rho_l^f(\omega') = 0$ para $f \neq 0$ e $\rho_r^{f'}(\omega') = 0$ para $f' \neq 0, 1$. Dessa forma o elétron entra na HDB no canal $f = 0$ e pode sair pelos canais $f' = 0$ e $f' = 1$.

Fazendo-se a integral em relação a \mathbf{k} (veja apêndice A), obtém-se a seguinte relação para corrente total:

$$\bar{I}_T = \frac{2\pi ev^4 S m^*}{h^3 \beta} \sum_{f'} \int_{-\infty}^{\infty} dE |G_{11}^{0f'r}(E)|^2 \rho_l^0(E) \rho_r^{f'}(E) F(E) \quad (5.2.28)$$

em que

$$F(E) = \left\{ \ln \left[1 + e^{\beta(E_F^l - E)} \right] - \ln \left[1 + e^{\beta(E_F^r - E)} \right] \right\}. \quad (5.2.29)$$

Pode ser visto na expressão (5.2.28) que a contribuição do canal sem emissão de fônons é dada por G_{11}^{00} , enquanto a contribuição proveniente do canal com a emissão de fônons é dada por G_{11}^{01} .

Estas funções são calculadas no Apêndice B.

5.2.3 Resultados

Nesta secção, serão analisados os resultados computacionais das correntes provenientes dos canais com e sem emissão de fônon. Novamente considerou-se a HDB na condição de ressonância, i.e., as dimensões da HDB são as mesmas daquela considerada na secção (4.5).

No gráfico da figura (5.2) é mostrado a corrente total da HDB (figura (4.8)), à temperatura $T=15\text{K}$, e as contribuições provenientes dos canais sem emissão de fônons $f' = 0$ e com a emissão de fônons $f' = 1$. Nos cálculos das correntes, considerou-se o seguinte valor efetivo para interação elétron-fônons $\gamma = 0,45 \text{ meV}$ [16].

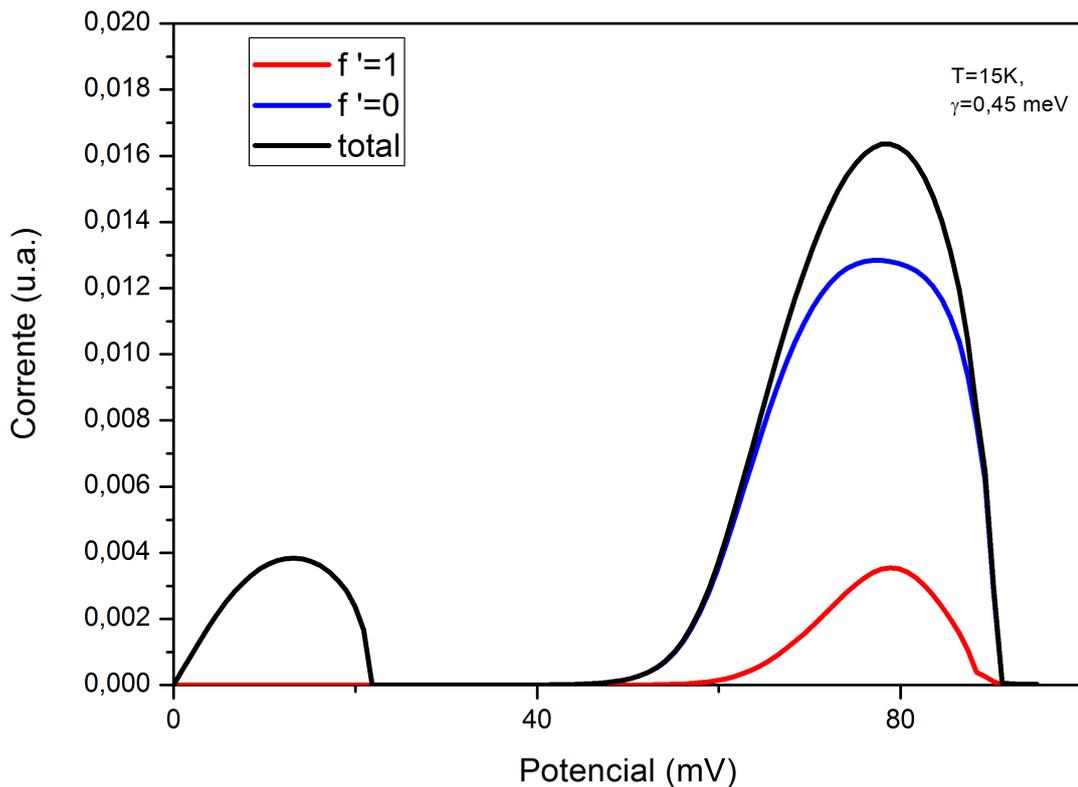


Figura 5.2: Corrente total do sistema e as respectivas contribuições dos canais para uma HDB (20/70/20 camadas).

Mantendo-se o número de camadas das barreiras ($N_l = N_r = 20$ camadas) e variando-se em quatro camadas, para mais e para menos, o poço da HDB na configuração de ressonância ($N_d =$

64,70,74), verifica-se no gráfico da figura (5.3) 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.

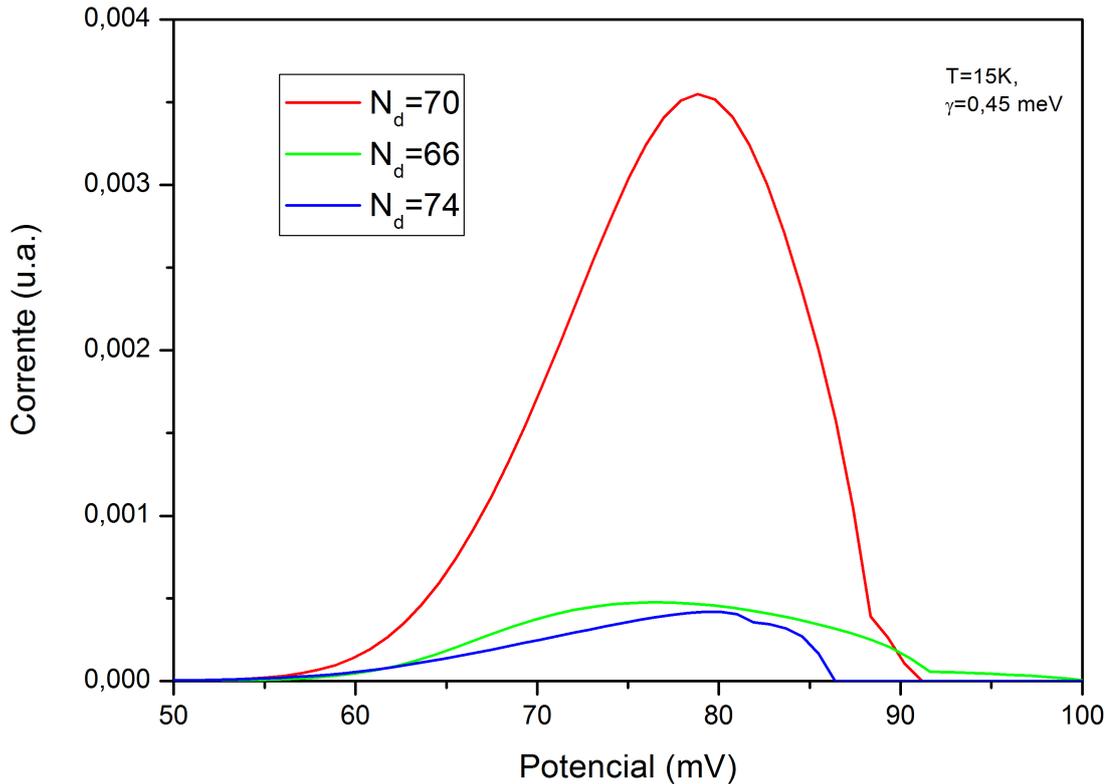


Figura 5.3: Variando o número de camadas N_d do poço.

Diminuindo-se o número de camadas do fundo do poço, de $N_d = 70$ (configuração de ressonância) para $N = 45$ (fora da configuração ressonante), pode-se observar nos gráficos (5.4) e (5.5) que os picos de correntes provenientes da interação elétron-fônon ($f' = 1$), ampliados 10^3 , se encontram nas regiões de energias menores que o primeiro pico excitado. No cálculo da corrente, representada pelo gráfico (5.5), diminuiu-se o número de sítios da barreira a esquerda (de $N_e = 20$ para $N_e = 18$) e aumentou-se o número de camada da barreira a direita de ($N_r = 20$ para $N_r = 22$), em relação a HDB considerada pelo cálculo da corrente do gráfico (5.4). Comparando-se as proporções dos pontos de maiores intensidades dos picos dos canais $f' = 0$ e $f' = 1$ em ambos os gráficos, observa-se que a corrente proveniente da interação elétron-fônon tem um aumento relativo (de $2,9 \times 10^{-4}$ para $3,12 \times 10^{-4}$) para o sistema de HDB assimétrico.

Isto ocorre pois a quantidade de elétrons, que tunelam pela barreira a esquerda, aumenta com a diminuição da largura da mesma e o tempo de permanência dos elétrons dentro do poço aumenta com o aumento da largura da barreira a direita, assim a soma destes fatores faz com que a taxa de transição do estado excitado para o estado fundamental aumente.

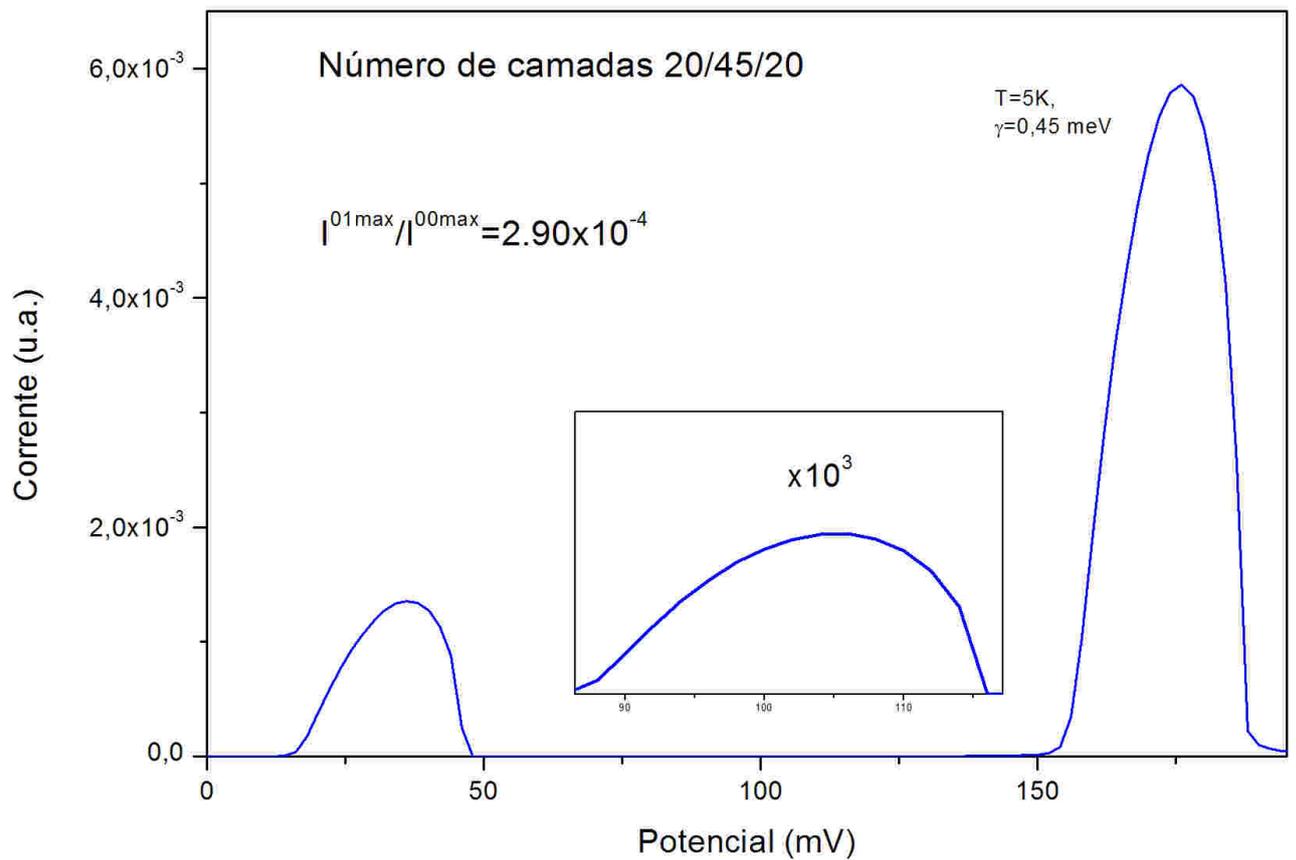


Figura 5.4: Corrente total para uma HDB de 20/45/20 camadas.

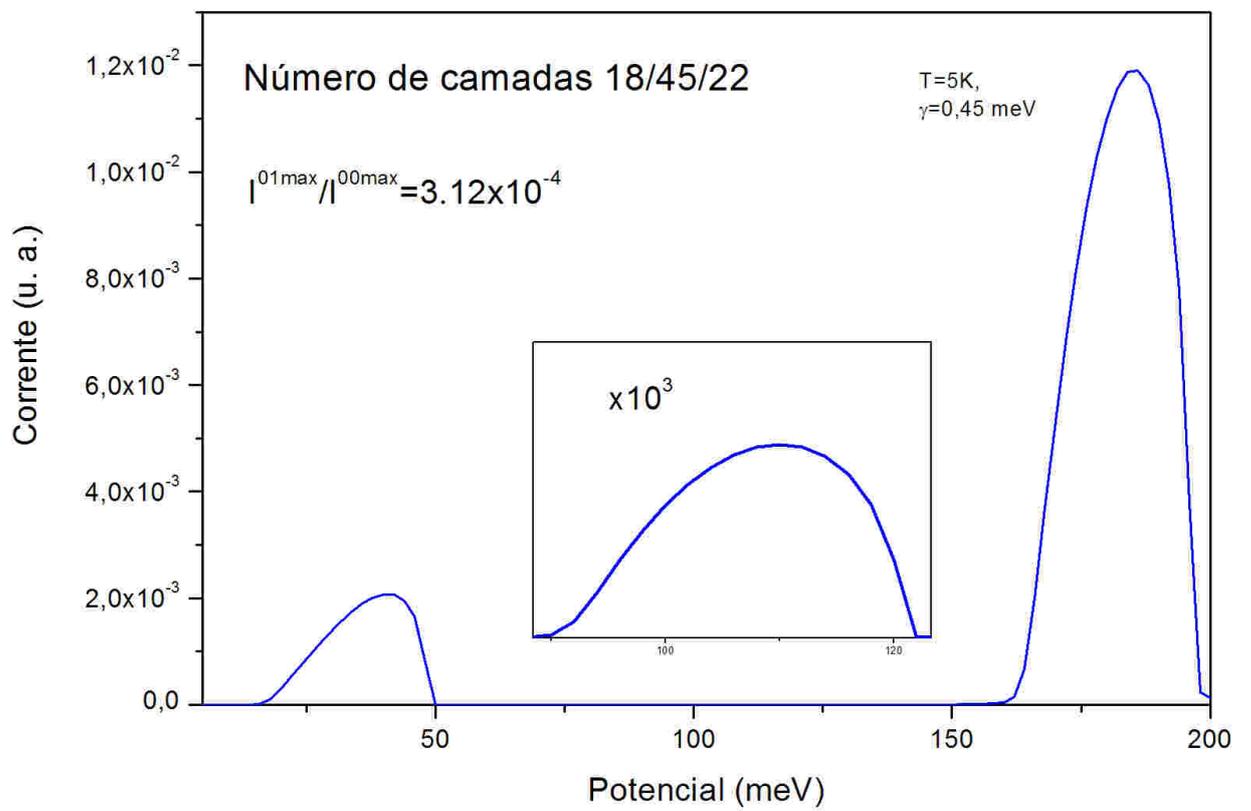


Figura 5.5: Corrente total para uma HDB de 18/45/22 camadas.

6 EMISSÃO DOS FÔNONS E ACÚMULO DE CARGA NA HDB

6.1 EQUAÇÕES CINÉTICAS

Será mostrado nesta secção o sistema de equações tridimensionais que governam um balanço das populações de elétrons e fônons dentro do poço. Neste problema, as taxas de crescimento de elétrons e fônons dependem dos respectivos momentos paralelos à área perpendicular à direção da corrente [16, 66], $\mathbf{k}_{0\parallel}$, $\mathbf{k}_{1\parallel}$ e \mathbf{q}_{\parallel} .

A taxa de crescimento do número de elétrons injetados no primeiro estado excitado é dada por:

$$\frac{dn_{1'}(\mathbf{k}_{1'\parallel})}{dt} = Q(\mathbf{k}_{1'\parallel}) - \sum_{\mathbf{q}_{\parallel}\mathbf{k}_{0'\parallel}} [w_+n_{1'}(\mathbf{k}_{1'\parallel}) - w_-n_{0'}(\mathbf{k}_{0'\parallel})] - R_{1'}(\mathbf{k}_{1'\parallel})n_{1'}(\mathbf{k}_{1'\parallel}), \quad (6.1.1)$$

na qual $Q(\mathbf{k}_{1'\parallel}) = I(\mathbf{k}_{1'\parallel})/e$ é a taxa de elétrons que entram na barreira esquerda com momentum $\mathbf{k}_{1'\parallel}$ perpendicular à direção da corrente (i.e., a densidade espectral de corrente). Aqui, as distribuições de elétrons nos estados fundamental e excitado são $n_0(\mathbf{k}_{0\parallel})$ e $n_{1'}(\mathbf{k}_{1'\parallel})$. A taxa de escape dos elétrons através da barreira esquerda é escrita como $R_{1'}(\mathbf{k}_{1'\parallel})$ para os elétrons do estado excitado e $R_{0'}(\mathbf{k}_{0'\parallel})$ para os elétrons do estado fundamental. Os termos w_+ e w_- são as taxas de emissão e absorção de fônons LO com um dado momentum q_{\parallel} .

Do mesmo modo, pode-se escrever a equação de balanço para elétrons no estado fundamental,

$$\frac{dn_{0'}(\mathbf{k}_{0'\parallel})}{dt} = \sum_{\mathbf{q}_{\parallel}\mathbf{k}_{0'\parallel}} [w_+n_{1'}(\mathbf{k}_{1'\parallel}) - w_-n_{0'}(\mathbf{k}_{0'\parallel})] - R_{0'}(\mathbf{k}_{0'\parallel})n_{0'}(\mathbf{k}_{0'\parallel}). \quad (6.1.2)$$

Para estabelecer a equação cinética dos fônons LO, supõe-se que a taxa de escape dos fônons seja desprezível em relação a sua taxa de decaimento

$$\frac{dn_{LO}(\mathbf{q}_{\parallel})}{dt} = \sum_{\mathbf{q}_{\parallel}\mathbf{k}_{0'\parallel}} [w_+n_{1'}(\mathbf{k}_{1'\parallel}) - w_-n_{0'}(\mathbf{k}_{0'\parallel})] - \alpha_0(\mathbf{q}_{\parallel})n_{LO}(\mathbf{q}_{\parallel}), \quad (6.1.3)$$

Sendo n_{LO} o número dos fônons primários e $\alpha_0(\mathbf{q}_{\parallel}) = \gamma_0(1 + n_{TA})$ é a taxa de decaimento dos fônons LO. O fator $(1 + n_{TA})$ leva em conta o processo de emissão estimulada de fônons TA [41]. Finalmente, a seguinte relação é obtida para os fônons TA:

$$\frac{dn_{TA}(\mathbf{q}_{\parallel})}{dt} = \alpha_0(\mathbf{q}_{\parallel})n_{LO}(\mathbf{q}_{\parallel}) - \frac{n_{TA}}{\tau}, \quad (6.1.4)$$

em que n_{TA} é o número de fônons secundários e τ^{-1} é a taxa de escape destes fônons através do poço.

Apesar das equações (6.1.1) à (6.1.4) serem do tipo integro-diferenciais, estas podem ser reduzidas ao seguinte sistema de equações simplificadas, mostradas nos trabalhos [16, 67, 68].

$$\frac{dn_{1'}}{dt} = Q - w[n_{1'}(n_{LO} + 1) - n_{0'}n_{LO}] - R_{1'}n_{1'}, \quad (6.1.5)$$

$$\frac{dn_{0'}}{dt} = w[n_{1'}(n_{LO} + 1) - n_{0'}n_{LO}] - R_{0'}n_{0'}, \quad (6.1.6)$$

$$\frac{dn_{LO}}{dt} = w[n_{1'}(n_{LO} + 1) - n_{0'}n_{LO}] - \gamma_0(1 + n_{TA})n_{LO}, \quad (6.1.7)$$

$$\frac{dn_{TA}}{dt} = \gamma_0(1 + n_{TA})n_{LO} - \frac{n_{TA}}{\tau}. \quad (6.1.8)$$

O termo $w[n_{1'}(n_{LO} + 1) - n_{0'}n_{LO}]$ representa o balanço líquido das taxas de emissão e de absorção de fônons LO, a taxa de emissão dos fônons LO w foi calculada a partir do modelo de Licari e Evrard [69]. O número de elétrons no estado excitado decresce para cada fônon emitido. O fator $(1 + n_{LO})$ nas equações anteriores descreve a emissão estimulada [41]. A taxa de decaimento dos fônons LO é dada pelo parâmetro $\gamma_0(1 + n_{TA})n_{LO}$.

As soluções estacionárias desse sistema de equações são obtidas, igualando-se as derivada temporais à zero:

$$Q = R_{0'}n_{0'} + R_{1'}n_{1'}, \quad (6.1.9)$$

$$R_{0'}n_{0'} = w[n_{1'}(n_{LO} + 1) - n_{0'}n_{LO}], \quad (6.1.10)$$

$$R_{0'}n_{0'} = \gamma_0(1 + n_{TA})n_{LO}, \quad (6.1.11)$$

$$\frac{n_{TA}}{\tau} = \gamma_0(1 + n_{TA})n_{LO}. \quad (6.1.12)$$

Considerando-se Q , $R_{0'}$, $R_{1'}$, γ_0 , w e τ como parâmetros independentes das populações. Expressando-se os resultados em termos dos fônons transversais acústicos n_{TA} , obtêm-se as relações entre populações. Da equação (6.1.12), encontra-se:

$$n_{LO} = \frac{n_{TA}}{\gamma_0(1 + n_{TA})\tau}. \quad (6.1.13)$$

Fazendo-se a diferença entre as relações (6.1.11) e (6.1.12), encontra-se

$$n_{0'} = \frac{n_{TA}}{\tau R_{0'}}. \quad (6.1.14)$$

Substituindo-se esse resultado na eq. (6.1.9), obtém-se:

$$n_{1'} = \frac{Q - n_{TA}/\tau}{R_{1'}}. \quad (6.1.15)$$

Substituindo-se, em seguida, as equações anteriores na equação (6.1.10) que dá o balanço líquido entre as taxa de emissão e absorção dos fônons LO, encontra-se uma equação não linear para os n_{TA} :

$$\left[1 + \tau\gamma_0 + \frac{\gamma_0\tau R_{1'}}{w} + \frac{R_{1'}}{R_{0'}}\right]n_{TA}^2 + \left[\tau + \frac{\gamma_0\tau R_{1'}}{w} - Q\tau(\gamma_0\tau + 1)\right]n_{TA} - Q\tau^2\gamma_0 = 0. \quad (6.1.16)$$

A equação (6.1.16) apresenta uma raiz positiva para n_{TA} e uma outra que é espúria. Para o cálculo da taxa de escape dos elétrons, através da barreira à direita, foi feito uma aproximação clássica, dada por:

$$R_{m'} = \frac{1}{2d}v(k_{m'})T_{m'}, \quad \text{para } m' = 0', 1'. \quad (6.1.17)$$

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). Assim, para barreira direita, obtém-se:

$$R_{m'} = \frac{1}{2d}v(k)T_{m'} = \frac{1}{2d} \left(\frac{2E_{m'}}{m^*}\right)^{1/2} T_{m'}. \quad (6.1.18)$$

A transmitância em uma barreira simples é dada por:

$$T_{m'}^{-1} = 1 + \frac{V^2}{4E(V - E_{m'})} \sinh^2 \left(\frac{2l_b}{\hbar} \sqrt{2m(V - E_{m'})} \right), \quad (6.1.19)$$

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 camada da barreira à direita.

6.2 EFEITOS DA ACUMULAÇÃO DE CARGA

Nesta secção será incluída a interação elétron-elétron em 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,

$$\sigma(z_j) = \sigma_j = -\frac{e}{S}(n_{0'}|u_{0'j}|^2 + n_{1'}|u_{1'j}|^2), \quad (6.2.1)$$

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:

$$q = \sum_{j=0}^{N-1} q_j = \sum_{j=0}^{N-1} \sigma(z_j)S = -e(n_{0'} + n_{1'}), \quad (6.2.2)$$

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 .

$$\nabla^2 \phi(z) = \frac{d^2 \phi(z)}{dz^2} = -\frac{\rho(z)}{\epsilon}, \quad (6.2.3)$$

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

$$\rho(z_j) = \frac{\sigma(z_j)}{a}, \quad (6.2.4)$$

onde a é a distância entre os planos perpendiculares à z . Utilizando-se da aproximação da derivada segunda em diferenças finitas, dada por:

$$\frac{d^2 \phi(z_j)}{dz^2} \approx \frac{\phi_{j-1} - 2\phi_j + \phi_{j+1}}{a^2}, \quad (6.2.5)$$

A seguinte relação para equação de Poisson é obtida.

$$\phi_{j-1} - 2\phi_j + \phi_{j+1} = -\frac{a\sigma_j}{\varepsilon}, \quad (6.2.6)$$

em que $\phi(z_j) = \phi_j$ e σ_j é dado pela eq.(6.2.2). Sabendo-se que o potencial ϕ_j satisfaz a condição de contorno homogênea:

$$\phi_1 = \phi_N = 0.$$

A eq. (6.2.5) pode ser escrita em termos de matrizes:

$$\mathbf{M}\phi = -\tilde{\sigma}, \quad (6.2.7)$$

ou

$$\begin{bmatrix} \ddots & \ddots & \ddots & & \\ \ddots & -2 & 1 & 0 & \\ \ddots & 1 & -2 & 1 & \\ & 0 & 1 & -2 & \ddots \\ & & \ddots & \ddots & \ddots \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \phi_0 \\ \vdots \\ \phi_j \\ \vdots \\ \phi_{N-1} \end{bmatrix} = - \begin{bmatrix} \frac{a\sigma_1}{\varepsilon} \\ \vdots \\ \frac{a\sigma_j}{\varepsilon} \\ \vdots \\ \frac{a\sigma_{N-1}}{\varepsilon} \end{bmatrix}. \quad (6.2.8)$$

Multiplicando-se a eq. (6.2.7) pela matriz inversa de \mathbf{M} , obtém-se,

$$\mathbf{M}^{-1}\mathbf{M}\phi = -\mathbf{M}^{-1}\tilde{\sigma}, \quad (6.2.9)$$

ou

$$\phi = \mathbf{G}^e \tilde{\sigma}, \quad (6.2.10)$$

na qual

$$\mathbf{G}^e = -\mathbf{M}^{-1}. \quad (6.2.11)$$

\mathbf{G}^e é a função de Green eletromagnética discreta unidimensional cujas componentes são dadas por:

$$G_{ij}^e = \begin{cases} \frac{1}{N+1}i(N+1-j) & \text{if } i \leq j; \\ \frac{1}{N+1}j(N+1-i) & \text{if } i > j. \end{cases} \quad (6.2.12)$$

em que N é o número de planos dentro da HDB. Essas relações satisfazem as seguintes relações:

$$G_{1j}^e = G_{Nj}^e = 0, \quad (6.2.13)$$

$$G_{ij-1}^e - 2G_{ij}^e + G_{ij+1}^e = \delta_{ij}. \quad (6.2.14)$$

Portanto, da eq. (6.2.10), encontra-se o potencial criado pelos elétrons dentro do poço:

$$\phi_j = \frac{a}{\varepsilon(N+1)} \left[\sum_{j<i} j(N+1-i)\sigma_j + \sum_{j\geq i} i(N+1-j)\sigma_j \right]. \quad (6.2.15)$$

Assim, no formalismo segunda quantização, o hamiltoniano devido a interação elétron-elétron dentro do poço é dado por:

$$\hat{H}_{e-e} = -e \sum_{j=0}^{N+1} \phi_j c_j^\dagger c_j. \quad (6.2.16)$$

Introduzindo-se essa interação no hamiltoniano eletrônico inicial, eq. (4.1.1),

$$\hat{H}_e = \hat{H}_e + \hat{H}_{e-e}^n. \quad (6.2.17)$$

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.

7 RESULTADOS E CONCLUSÕES

7.1 RESULTADOS FINAIS

Nos cálculos computacionais do transporte eletrônico e de emissão de fônons, foi utilizado uma HDB na configuração de ressonância, i. e., as dimensões da HDB faz com que a diferença entre as energias dos dois primeiros níveis da dupla barreira esteja próxima da energia do fônon LO do GaAs. Dessa forma a largura do poço, feito de GaAs, é de $d = 197.75\text{Å}$ (70 camadas) e as larguras das barreiras são iguais à $b_l = b_r = 56.5\text{Å}$ (20 camadas), feitas de AlGaAs com uma concentração de alumínio de $x=0.38$ que corresponde a uma barreira de altura de $V=300$ meV. A energia de Fermi no emissor GaAs foi tomada sendo 15 meV e o valor efetivo da interação elétron-fônon (o γ da eq. (5.2.8)) foi considerado sendo igual a 0.45meV [16]. A partir de [41], foi considerada a seguinte taxa de escape $\gamma_0 = 11ps^{-1}$. Do trabalho de Makler et. al. [16] foram escolhidos $w = 7.5ps^{-1}$ e $\tau = 10ps$. As taxas de escape $R_{0'}$ e $R_{1'}$ variam ligeiramente com o potencial externo e são da ordem de $R_{0'} = 0.07ps^{-1}$ e $R_{1'} = 0.5ps^{-1}$. A área considerada no dispositivos é de ($S = 0.5 \times 10^{-3}mm^2$) [?].

A partir da relação da corrente que considera a interação elétron-fônon e das equações cinética, após o processo de auto-consistência, foram obtidas, a temperatura $T=0K$, a corrente de elétrons e o correspondente fluxo dos fônons TA (intensidade de saser) os quais escapam do poço em função da tensão aplicada U , mostrada na figura (7.1). Através desse gráfico, pode ser visto que a tensão aplicada é um ótimo parâmetro para o controle do saser, dado que os comportamentos das intensidades são similares para ambos os fluxos de partículas (elétrons e fônons). A interação elétron-fônon começa em $U \approx 73mV$ e termina em $U \approx 91mV$. O máximo da taxa do fluxo dos fônons TA ocorre em $U = 84.6mV$. A corrente de elétrons é instável entre os potenciais $U = 74.3 mV$ e $U = 78.9 mV$. Esta instabilidade está relacionada ao efeito de relaxação sofrido pelos elétrons no poço, quando ocorre a emissão dos fônons LO, levando-se a uma redistribuição de cargas no sistema e, conseqüentemente, a uma mudança interdependente no perfil do potencial, ou seja, a carga acumulada no poço da HDB interfere na operação do dispositivo. O crescimento da quantidade de cargas no poço faz com que ocorra uma elevação nos níveis de

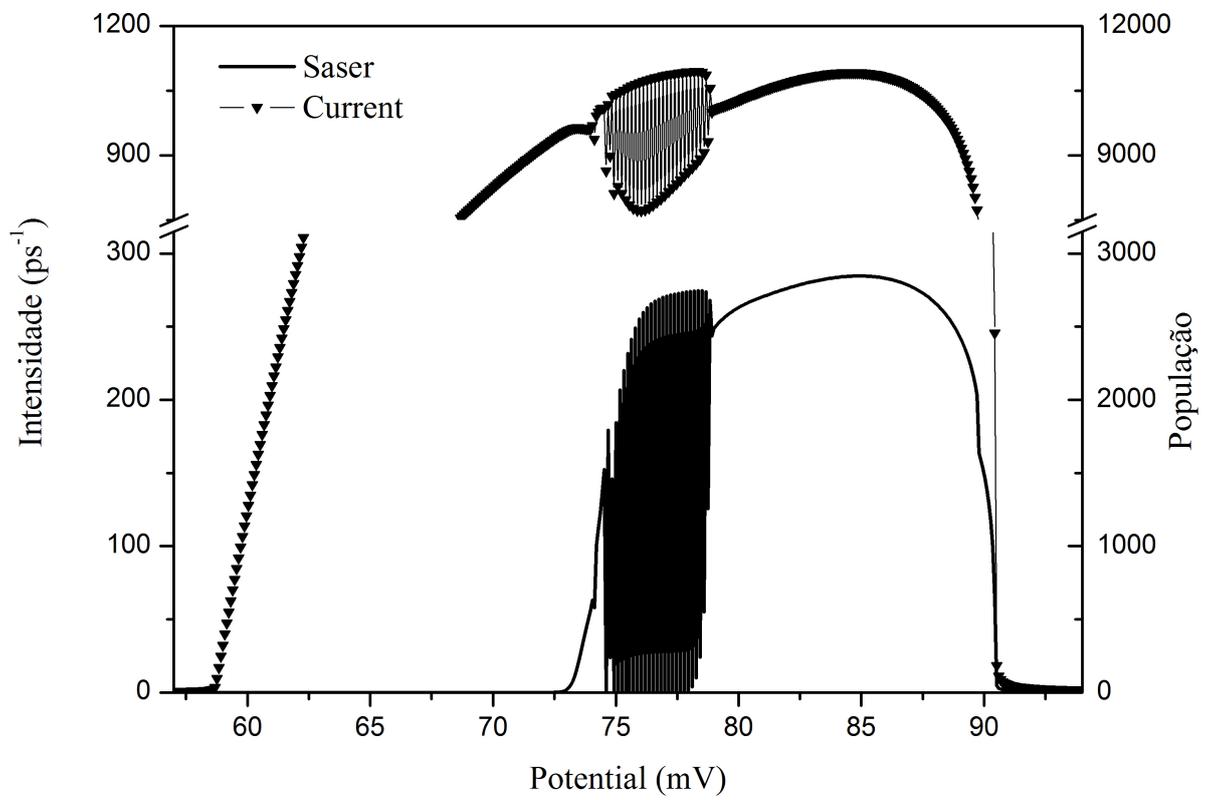


Figura 7.1: As taxas e os números de elétrons e fônons TA calculados auto-consistentemente para uma dupla barreira de 20–70–20 camadas a $T \approx 0K$.

energias juntamente com uma redução na diferença de energia entre o primeiro estado excitado e o estado fundamental, colocando assim o dispositivo na condição fora da ressonância. Nesta situação, em que o dispositivo está fora da condição de ressonância, a carga acumulada no poço tende a diminuir, fazendo-se 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. Deste modo, o dispositivo volta à condição de ressonância. Porém, tudo isto não acontece de imediato. Há um atraso entre a acomodação de cargas no poço e a mudança no perfil de potencial. Esse conjunto de eventos resulta no aparecimento de oscilações que ocorrem na curva da corrente do dispositivo, como mostra a figura (7.1). O comportamento das populações de elétrons e de fônons TA também é mostrado nesse gráfico.

Variando-se a temperatura da HDB em 10K, 50K, 75K e 100K pode ser visto no gráfico da figura (7.2) que o limiar de emissão de fônons TA diminui, enquanto a região de instabilidade se alarga, à medida que a temperatura aumenta. Isso ocorre porque elétrons localizados perto do nível de Fermi do emissor são excitados para estados de maiores energias com o aumento da temperatura. Desta forma, os elétrons caem no poço a potenciais menores, aumentando assim os efeitos provenientes das interações elétron-elétron e elétron-fônon. Para corrente às temperaturas à 75K e 100K, verificam-se que as intensidades do saser não vão à zero no final de suas curvas. Isto acontece pois a corrente de elétrons do segundo estado excitado interfere com a corrente do primeiro estado excitado. Esta interferência se torna acentuada com o aumento da temperatura. Logo em futuros trabalhos, deve-se considerar a corrente proveniente do segundo estado excitado nas equações cinéticas para temperaturas acima de 75K.

Mudando-se o tamanho da barreira a direita da HDB de 20 camadas para 11 camadas e considerando-se as mesmas temperaturas do gráfico anterior fig. (7.2), podem ser vistos no gráfico da figura (7.3) que o início da emissão dos fônons TA em $U = 67.5\text{mV}$ não se modifica com o aumento da temperatura e que a intensidade do saser depende da temperatura. A não mudança do limiar do potencial de emissão ocorre pois os elétrons que tunelam pela barreira à esquerda ficam confinados em períodos mais curtos no poço por causa do tamanho da largura da barreira à direita considerada. Portanto, para essa configuração da HDB, as cargas injetadas no poço não influenciam de forma significativa os níveis de energia do poço, conseqüentemente, o limiar de emissão do fônon TA permanece o mesmo. O aumento da intensidade do saser com a temperatura ocorre pois a corrente, que alimenta a emissão dos fônons TA, depende da temperatura através da distribuição de Fermi-Dirac.

Modificando-se a largura de ambas barreiras da HDB (20/70/20 camadas), pode-se estudar o comportamento de instabilidade da emissão dos fônons TA. Desta forma, mantendo-se o

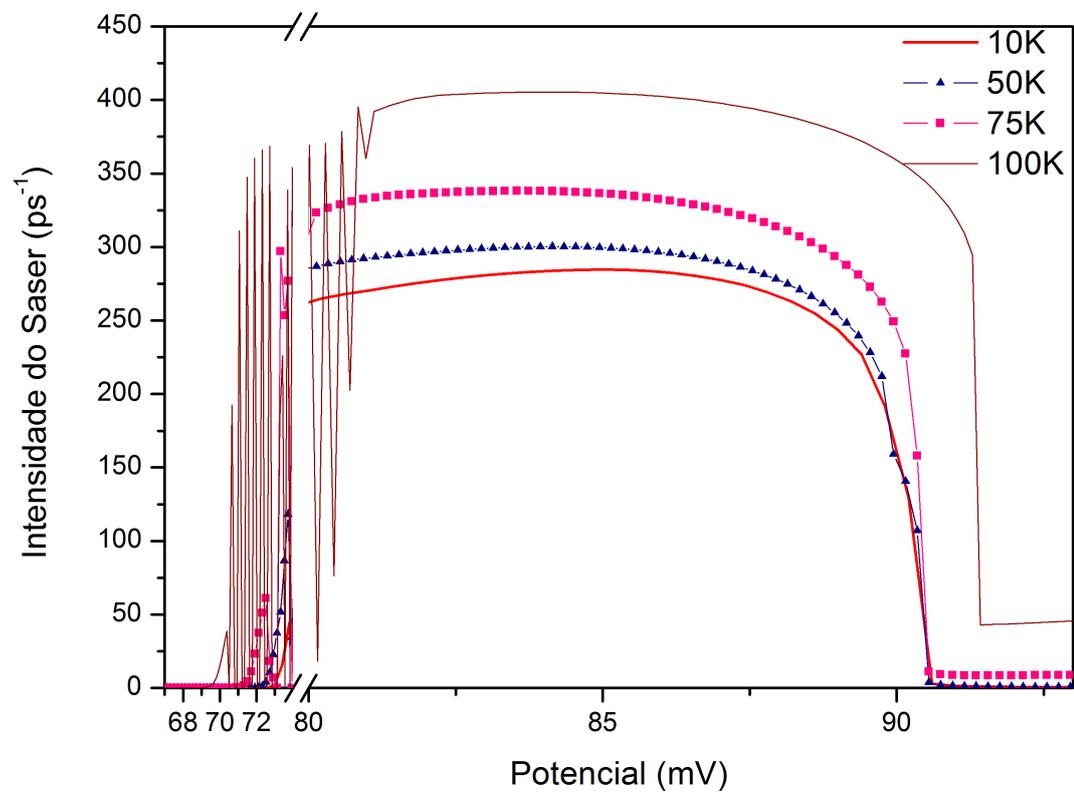


Figura 7.2: O saser em uma HDB (20/70/11 camadas) para temperaturas $T=10\text{K}$, 50K , 75K e 100K .

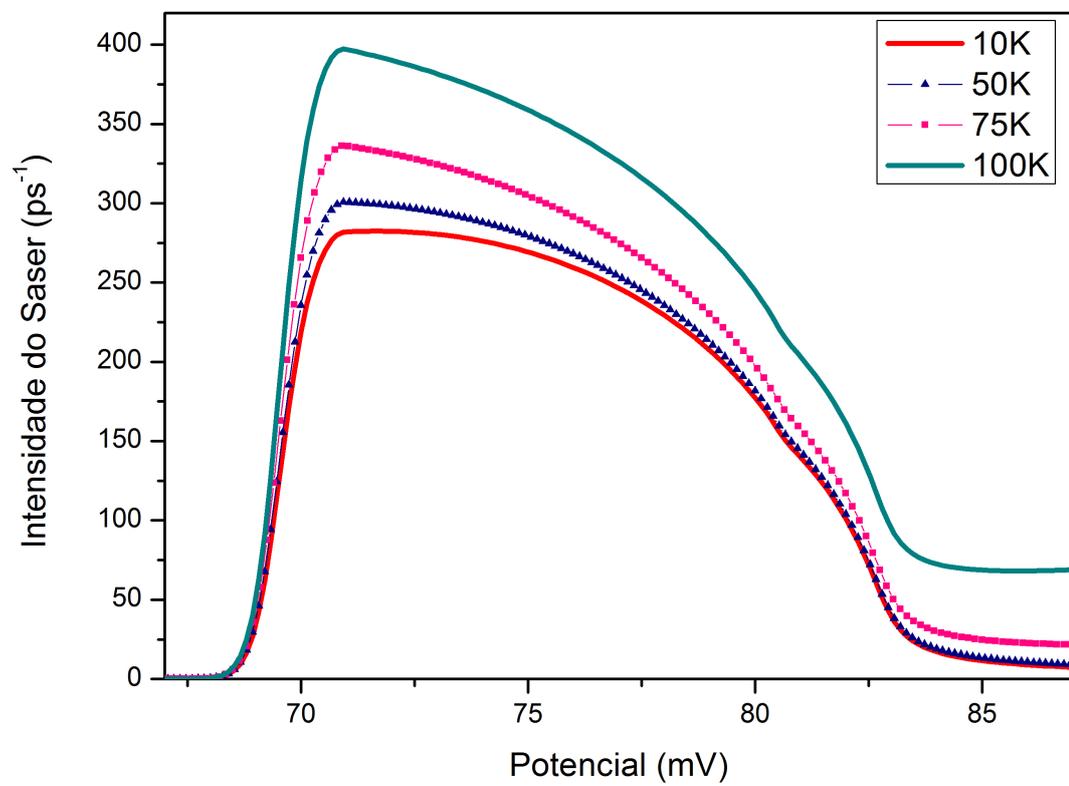


Figura 7.3: A intensidade do saser em função da potencial em uma HDB (20/70/11 camadas), considerando-se as mesmas temperaturas do gráfico da fig. (7.2).

número de camadas do poço constante $N_d = 70$ e variando-se o número de camadas de ambas barreiras em $N_b = 11, 12, 14$, foram encontradas as seguintes correntes de elétrons e as correspondentes intensidades do saser para cada largura de barreira, mostradas nos gráficos das figuras (7.4) e (7.5). Nesses gráficos, podem ser vistos que o limiar do potencial de emissão dos fônons TA e a largura da instabilidade aumentam a medida que se alargam as barreiras e que a instabilidade desaparece para barreiras menores do que doze camadas.

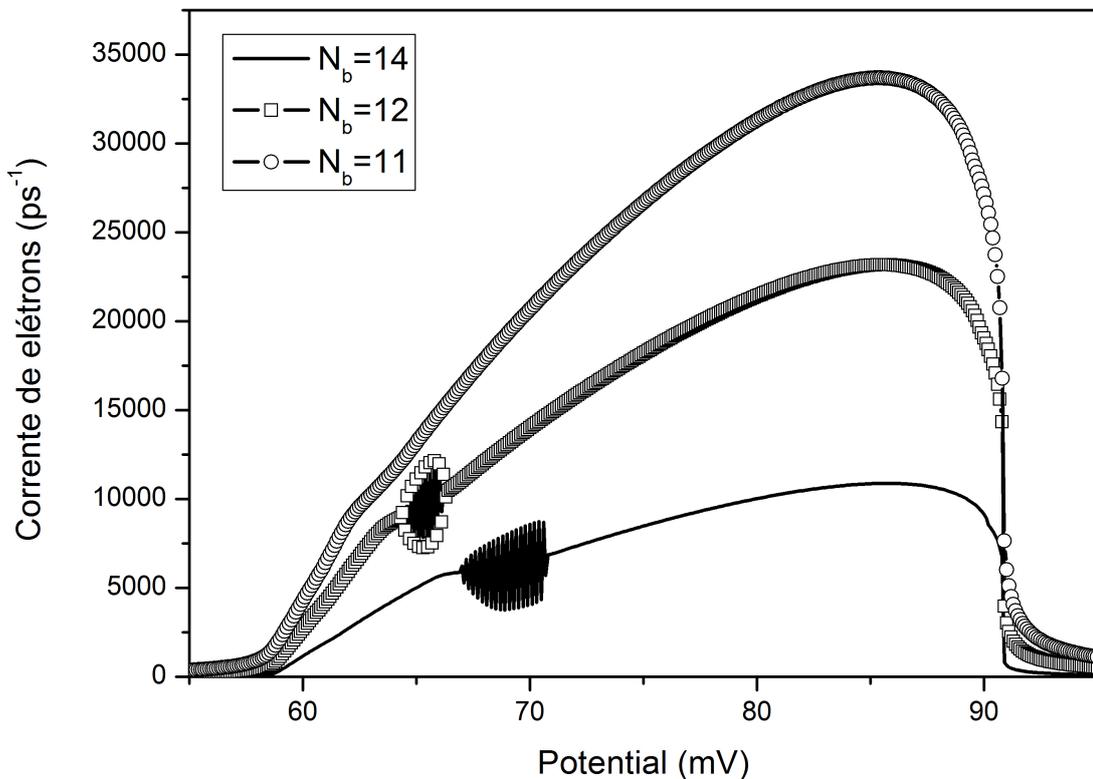


Figura 7.4: A corrente de elétrons em função do potencial aplicado para as seguintes larguras de barreiras $N_b = 11, 12, 14$.

O processo de biestabilidade se torna acentuado com o aumento da largura da barreira à direita (de 20 para 21 camadas) da HDB na configuração de ressonância (20/70/20 camadas), como pode ser visto na figura (7.6). Esse processo de biestabilidade ocorre na região em que a condutância diferencial é negativa, i.e., entre 91.3 mV a 93 mV. A biestabilidade surge da dependência mútua entre o perfil de potencial e a distribuição de cargas. Sua ocorrência próxima a região de corte da corrente é devida a variação de carga no poço, quando se aumenta ou diminui o potencial. Em outras palavras, quando se aumenta o potencial externo, ocorre um aumento de carga elétrica no poço, o qual influencia no aumento de energia dos níveis, devido

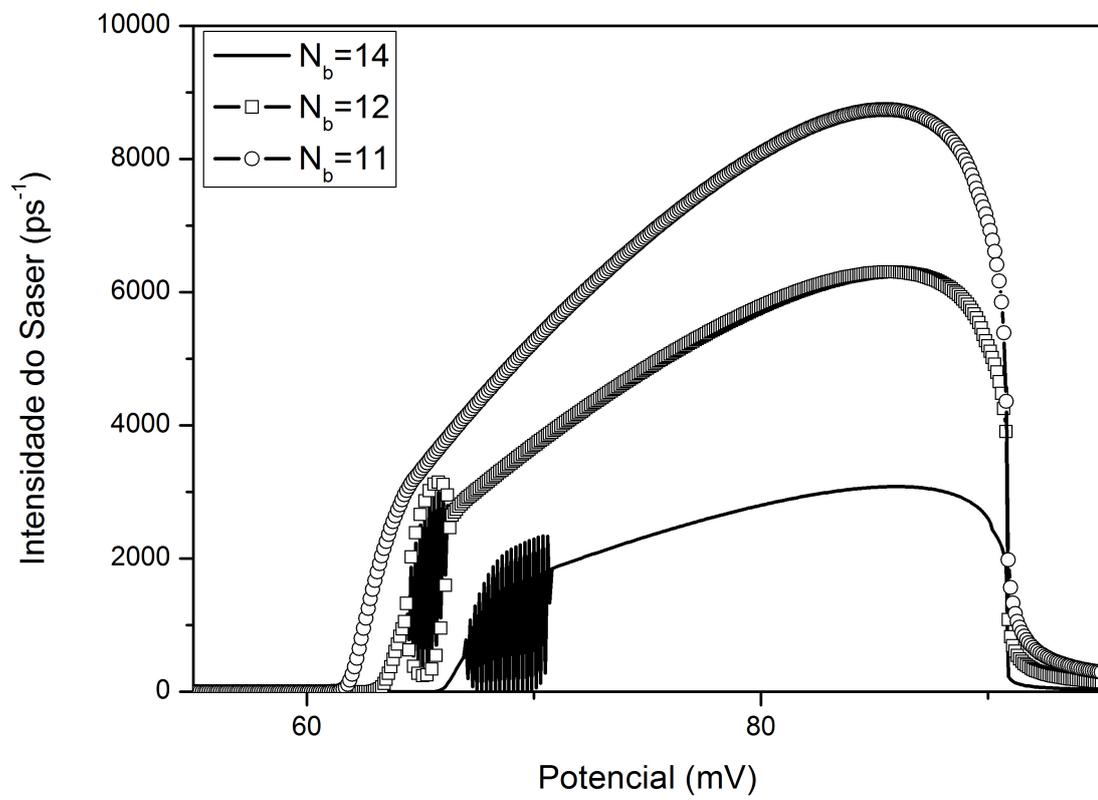


Figura 7.5: Saser para as seguintes larguras de barreiras $N_b = 11, 12, 14$.

à repulsão de Coulomb. Com os níveis energeticamente mais elevados, é necessário fornecer uma energia adicional ao sistema para que o nível ressonante passe por baixo da banda de condução do emissor, resultando-se no corte de corrente no dispositivo. Quando se diminui o potencial externo a partir de potenciais maiores que 93 mV, ocorre que, não há carga acumulada no poço entre 91.3 mV a 93 mV, assim, o nível ressonante está inicialmente menos elevado energeticamente em relação ao caso anterior. Consequentemente, a corrente é inibida pois o primeiro estado excitado está abaixo do fundo da banda de condução do emissor. Portanto, para uma mesma energia fornecida a HDB, temos uma corrente igual a zero quando se aumenta o potencial e uma diferente de zero quando se diminui o mesmo. Este fenômeno é conhecido como histerese¹.

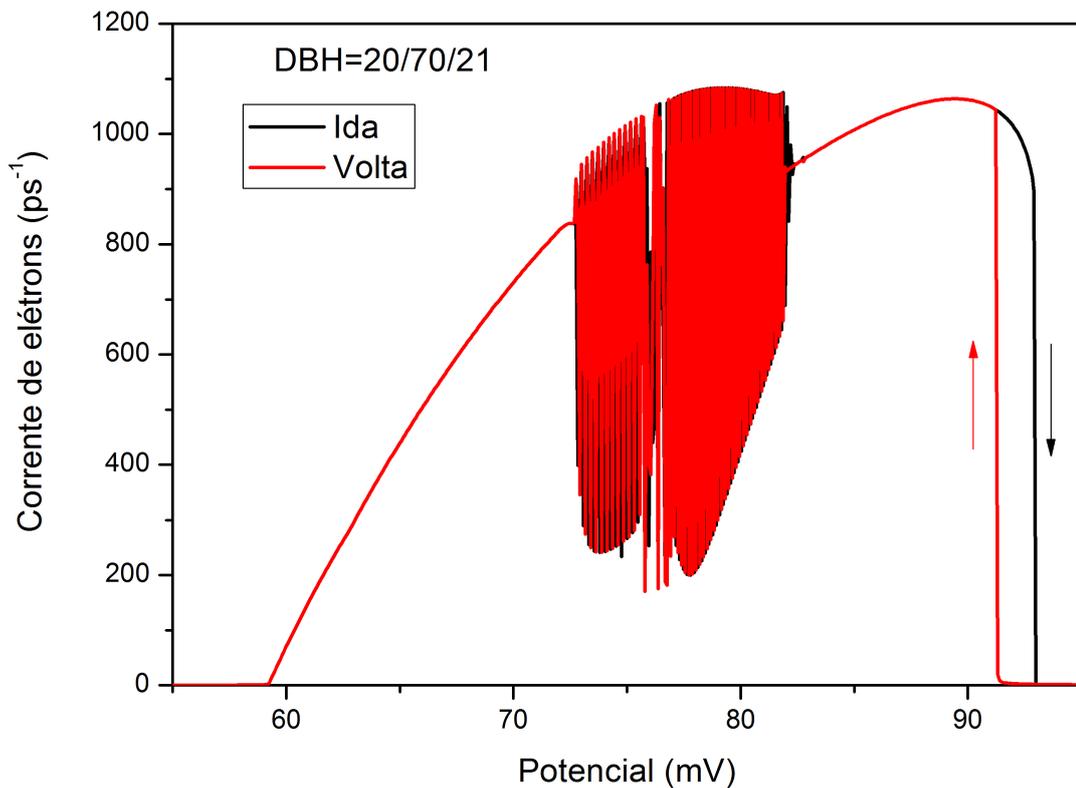


Figura 7.6: A corrente $\tilde{I}(U)$ características da HDB (20–70–21) a temperatura 0.1K, quando aumentamos e diminuímos do campo externo, representados pelas setas de ida e de volta.

¹Fenômeno apresentado por determinados sistemas físicos cujas propriedades dependem de sua historia precedente.

7.2 CONCLUSÕES FINAIS

Em síntese, foi apresentado nesta tese um formalismo quântico realístico via funções de Green de não equilíbrio para o estudo de um emissor contínuo de fônons TA coerentes, formado por uma HDB de GaAs-AlGaAs e controlado por um potencial externo. O hamiltoniano, considerado aqui, leva em conta as contribuições explícitas dos elétrons, dos três ramos dos fônons, da interação elétron-fônon e da interação elétron-elétron. A interação elétron-elétron dentro do poço foi tratada através da aproximação de Hartree. Pela primeira vez, as funções Green foram utilizadas para cálculos dos fluxos de elétrons e de fônons na HDB. Essas funções foram calculadas utilizando-se as equações de Dyson e um processo de dizimação o qual incluiu todos os estados do HDB. A dependência do sistema com a temperatura foi introduzida através do formalismo Keldysh. A corrente de elétrons, o fluxo de fônons e as respectivas populações no poço foram calculadas resolvendo as equações cinéticas adequadas. O perfil do potencial e a distribuição de carga no poço são calculados por um processo auto-consistente.

Os resultados mostram que: O potencial externo é um ótimo parâmetro para o controle do saser. Na HDB (de 20/70/20 camadas), o efeito de instabilidade do saser aumenta com o aumento da temperatura. Para temperaturas acima de 75K ocorre uma interferência entre o terceiro e o segundo pico de corrente. O limiar de emissão do saser em $U = 67.5\text{mV}$ não se modifica com o aumento da temperatura para uma HDB (20/70/11 camadas). Para evitar instabilidades na emissão do feixe coerente dos fônons TA, o número de camada de ambas barreiras da HDB deve ser inferior a 12 para um poço de largura de 70 camadas. Para uma HDB (20/70/21 camadas) o efeito de biestabilidade aparece entre 91.3 mV e 93 mV.

7.3 TRABALHOS PUBLICADOS

Trabalhos a ser publicados em revistas indexadas:

1. *The effect of temperature on a double-barrier generator of terahertz coherent phonons.*

L. C. Guarnieri, V. Anjos, S. S. Makler.

Enviado a *Physics Procedia*.

2. *The behavior of the DBH coherent phonons generator.*

L. C. Guarnieri, V. Anjos, S. S. Makler.

Enviado ao *Journal of Superconductivity and Novel Magnetism*.

3. *Properties of a THz coherent phonon generator at finite temperature.*

L. C. Guarnieri, V. Anjos, S. S. Makler.

Enviado a *Physical Review B*.

7.4 CONGRESSOS

Trabalhos apresentados em congressos nacionais em internacionais.

1. *Properties of a THz coherent phonon generator at finite temperature.*

L. C. Guarnieri, V. Anjos, S. S. Makler.

Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada.

10-14 de maio de 2010. Águas de Lindóia, SP, Brasil.

2. *The effect of temperature on a double-barrier generator of terahertz coherent phonons*

L. C. Guarnieri, V. Anjos, S. S. Makler.

20th Latin American Symposium on Solid State Physics (SLAFES XX)

27-31 de março de 2011. Maragogi, AL, Brasil

3. *A source of terahertz coherent acoustic phonons at finite temperature*

L. C. Guarnieri, V. Anjos, S. S. Makler.

15th Brazilian Workshop on Semiconductor Physics (BWSP-15)

10 de 15 de abril de 2011. Juiz de Fora, Minas Gerais, Brasil

4. *The behavior of a double barrier saser at non-zero temperature.*

L. C. Guarnieri, V. Anjos, S. S. Makler.

Encontro de Física 2011.

5-10 de junho de 2010. Foz do Iguaçu, PR, Brasil.

APÊNDICE A – INTEGRAL DA CORRENTE TOTAL

Será explicitado o cálculo da corrente total, eq. (4.4.13), o qual é dado por:

$$\bar{I}_T = \frac{S}{2\pi} \int_0^\infty dk_{\parallel} \bar{I}(k_{\parallel}) k_{\parallel}. \quad (\text{A.0.1})$$

Sabendo que:

$$\bar{I}(k_{\parallel}) = \frac{e}{h} v^4 \int_{-\infty}^{\infty} dE \{ |G_{\bar{1}1}(E)|^2 [n_l(k_{\parallel}) - n_r(k_{\parallel})] \rho_l(E) \rho_r(E) \}, \quad (\text{A.0.2})$$

obtém-se:

$$\bar{I}_T = \frac{S}{4\pi} \frac{ev^4}{h} \int_{-\infty}^{\infty} dE |G_{\bar{1}1}(E)|^2 \rho_l(E) \rho_r(E) \int_0^\infty dk_{\parallel}^2 [n_l(k_{\parallel}) - n_r(k_{\parallel})]. \quad (\text{A.0.3})$$

A integral em relação a k_{\parallel} do primeiro termo da equação (A.0.3) pode ser resolvida:

$$\int_0^\infty dk_{\parallel}^2 n_l(k_{\parallel}) = \int_0^\infty dk_{\parallel}^2 \left[e^{\beta \left(E + \frac{\hbar^2 k_{\parallel}^2}{2m^*} - E_F^l \right)} + 1 \right]^{-1}. \quad (\text{A.0.4})$$

Considerando-se a seguinte mudança de variável

$$\beta \left(E + \frac{\hbar^2 k_{\parallel}^2}{2m^*} - E_F^l \right) = x, \quad (\text{A.0.5})$$

a seguinte relação para integral da eq. (A.0.4) é obtida:

$$\begin{aligned} \int_0^\infty dk_{\parallel}^2 n_l(k_{\parallel}) &= \int_{\beta(E-E_F^l)}^\infty dx \left(\frac{2m^*}{\beta\hbar^2} \right) \frac{1}{e^x + 1} = - \left(\frac{2m^*}{\beta\hbar^2} \right) \int_{\beta(E-E_F^l)}^\infty \frac{d(1+e^{-x})}{1+e^{-x}} \\ &= \left(\frac{2m^*}{\beta\hbar^2} \right) \ln[1 + e^{-\beta(E-E_F^l)}]. \end{aligned} \quad (\text{A.0.6})$$

Analogamente, a integral em relação k_{\parallel} do segundo termo da eq. (A.0.3), é dada por:

$$\int_0^\infty dk_{\parallel}^2 n_r(k_{\parallel}) = \left(\frac{2m^*}{\beta\hbar^2} \right) \ln[1 + e^{-\beta(E-E_F^r)}]. \quad (\text{A.0.7})$$

Consequentemente, a seguinte expressão para eq. (A.0.1) é encontrada:

$$I_T = \frac{2\pi e v^4 S m^*}{h^3 \beta} \int_{-\infty}^{\infty} dE |G_{11}^r(E)|^2 \rho_l(E) \rho_r(E) F(E), \quad (\text{A.0.8})$$

em que:

$$F(E) = \left\{ \ln \left[1 + e^{\beta(E_F^l - E)} \right] - \ln \left[1 + e^{\beta(E_F^r - E)} \right] \right\}. \quad (\text{A.0.9})$$

APÊNDICE B – FUNÇÃO DE GREEN NA HDB COM INTERAÇÃO ELÉTRON-FÔNON

Neste apêndice, serão encontradas, a partir do processo de dizimação, as funções de Green retardadas de um sistema de heteroestrutura de dupla barreira (HDB) com interação elétron-fônon dentro do poço.

Em termos das funções de Green, foram considerados dois canais um com fônon ($f = 1$) e o outro sem fônon ($f = 0$). O estado fundamental ($m' = 0'$) do canal com fônon está conectado através da interação elétron-fônon ao estado excitado ($m' = 1'$) do canal sem fônon, como mostra a figura (B.1). Os cálculos das funções de Green retardadas para o sistema de uma HDB com interação elétron-fônon são parecidos com àqueles feitos no capítulo 4. As diferenças entre os cálculos estão nas mudanças das energias dos elétrons que emitem fônons e na não dizimação dos estados que participam da emissão dos fônons.

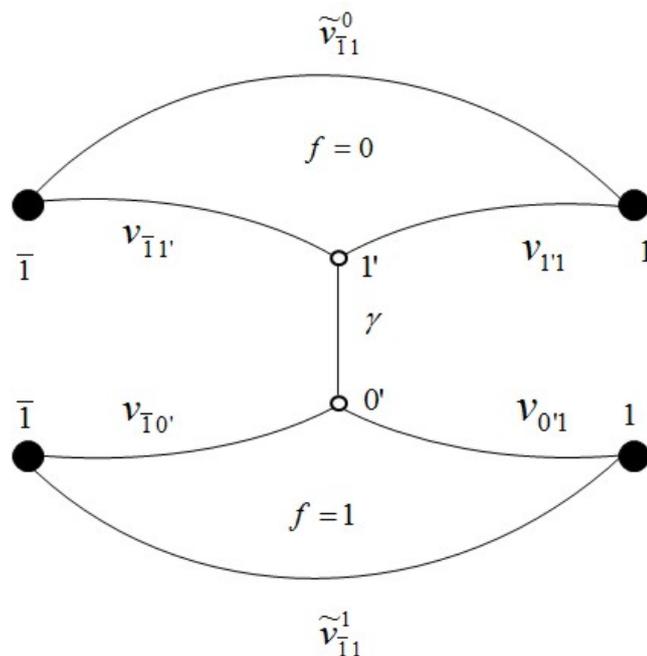


Figura B.1: Diagrama do cálculo das funções de Green na HDB com interação elétron-fônon.

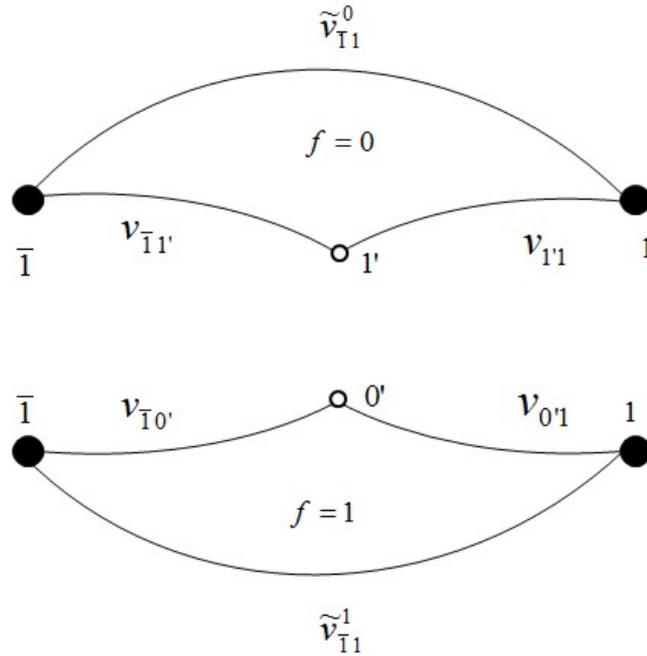


Figura B.2: Canais independentes.

As funções de Green retardadas procuradas são dadas pela equação de Dyson,

$$\mathbf{G} = \mathbf{g} + \mathbf{g}\mathbf{V}\mathbf{G} \quad (\text{B.0.1})$$

sendo \mathbf{V} os potenciais que conectam os sítios e \mathbf{g} as funções de Green de cada sítio antes da conexão. Para os cálculos se tornarem mais simples, separou-se a conexão \mathbf{V} em duas partes:

$$\mathbf{V} = \mathbf{V}_1 + \mathbf{V}_{\bar{1}}, \quad (\text{B.0.2})$$

em que \mathbf{V}_1 representa os ‘hopping’ entre os sítios e $\mathbf{V}_{\bar{1}}$ representa a interação entre elétron-fônon. Na forma inversa, a equação de Dyson pode ser separada em outras duas diretamente dependentes:

$$\mathbf{G}^{-1} = \tilde{\mathbf{g}}^{-1} + \mathbf{V}_{\bar{1}}, \quad (\text{B.0.3})$$

$$\tilde{\mathbf{g}}^{-1} = \mathbf{g}^{-1} - \mathbf{V}_1. \quad (\text{B.0.4})$$

A partir da relação (B.0.4) serão calculadas, primeiramente, as funções de Green dos canais independentes, representadas pelo diagrama da figura (B.2). Em seguida, da relação (B.0.4), serão obtidas as funções de Green dos canais conectados, representadas pelo diagrama da figura

(B.1). Dessa forma, as funções Green dos canais independentes são dadas pela relação:

$$\tilde{\mathbf{g}} = \mathbf{g} + \mathbf{g}\mathbf{V}_1\tilde{\mathbf{g}}, \quad (\text{B.0.5})$$

sendo \mathbf{g} e \mathbf{V} dadas por blocos de matrizes

$$\mathbf{g} = \begin{bmatrix} \mathbf{g}^0 & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{g}^1 \end{bmatrix}, \quad (\text{B.0.6})$$

$$\mathbf{V}_1 = \begin{bmatrix} \mathbf{V}^0 & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{V}^1 \end{bmatrix}, \quad (\text{B.0.7})$$

em que

$$\mathbf{g}^f = \begin{bmatrix} g_1^f & 0 & 0 \\ 0 & g_{m'}^f & 0 \\ 0 & 0 & g_1^f \end{bmatrix}, \quad (\text{B.0.8})$$

$$\mathbf{V}^f = \begin{bmatrix} 0 & v_{\bar{1}m'} & \tilde{v}_{\bar{1}1}^f \\ v_{\bar{1}m'} & 0 & v_{1m'} \\ \tilde{v}_{\bar{1}1}^0 & v_{1m'} & 0 \end{bmatrix}, \quad (\text{B.0.9})$$

$$g_1^f = \frac{1}{\omega - f(\hbar\omega_0) - \varepsilon_1^f - \Sigma_l - \Sigma_1^f}, \quad (\text{B.0.10})$$

$$g_{m'}^f = \frac{1}{\omega - f(\hbar\omega_0) - E_{m'}}, \quad (\text{B.0.11})$$

$$g_1^f = \frac{1}{\omega - f(\hbar\omega_0) - \varepsilon_1^f - \Sigma_r - \Sigma_1^f}, \quad (\text{B.0.12})$$

$$\Sigma_j^f = \sum_{m \neq m'}^{N-1} v_{jm} g_m^f v_{mj}, \quad \text{para } j = \bar{1}, 1 \quad (\text{B.0.13})$$

$$g_m^f = \frac{1}{\omega - f(\hbar\omega_0) - E_m}. \quad (\text{B.0.14})$$

$$\Sigma_l^f = \Sigma_l(\omega - f(\hbar\omega_0)), \quad (\text{B.0.15})$$

$$\Sigma_r^f = \Sigma_r(\omega - f(\hbar\omega_0)), \quad (\text{B.0.16})$$

$$\tilde{v}_{11}^f = \tilde{v}_{11}^f = \sum_{m \neq m'}^{N-1} v_{1m} g_m^f v_{m1}, \quad (\text{B.0.17})$$

sendo que para $f=0$, $m'=1'$ e para $f=1$, $m'=0'$. Lembrando que $v_{1m} = vu_{0'm}$, $v_{1m} = vu_{N'm}$, $m = 0', 1', \dots, N-1$, $\varepsilon_{1'}' = -2v$ e $\varepsilon_1' = -2v - U$. Os blocos de matrizes fora das diagonais de \mathbf{g} e \mathbf{V} são iguais a zero, conseqüentemente, a matriz $\tilde{\mathbf{g}}$ é dada por:

$$\tilde{\mathbf{g}} = \begin{bmatrix} \tilde{\mathbf{g}}^0 & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \tilde{\mathbf{g}}^1 \end{bmatrix}. \quad (\text{B.0.18})$$

Dessa forma, pode-se trabalhar com cada bloco de forma separada e simétrica. Da relação (B.0.5), a primeira coluna do bloco $\tilde{\mathbf{g}}^0$ é dada por:

$$\tilde{g}_{1\bar{1}}^0 = g_1^0 + g_1^0 v_{1\bar{1}'} \tilde{g}_{1'\bar{1}}^0 + g_1^0 \tilde{v}_{1\bar{1}}^0 \tilde{g}_{1\bar{1}}^0, \quad (\text{B.0.19})$$

$$\tilde{g}_{1'\bar{1}}^0 = g_1^0 v_{1'\bar{1}} \tilde{g}_{1\bar{1}}^0 + g_1^0 v_{1'1} \tilde{g}_{1\bar{1}}^0, \quad (\text{B.0.20})$$

$$\tilde{g}_{1\bar{1}}^0 = g_1^0 v_{11'} \tilde{g}_{1'\bar{1}}^0 + g_1^0 \tilde{v}_{1\bar{1}}^0 \tilde{g}_{1\bar{1}}^0. \quad (\text{B.0.21})$$

Substituindo a relação (B.0.21) na (B.0.20), obtém-se:

$$[1 - g_1^0 v_{1'1} g_1^0 v_{11'}] \tilde{g}_{1'\bar{1}}^0 = g_1^0 [v_{1'\bar{1}} + v_{1'1} g_1^0 \tilde{v}_{1\bar{1}}^0] \tilde{g}_{1\bar{1}}^0,$$

ou

$$\tilde{g}_{1'\bar{1}}^0 = g_{1'd}^0 \Sigma_{1'\bar{1}}^0 \tilde{g}_{1\bar{1}}^0, \quad (\text{B.0.22})$$

em que:

$$\Sigma_{1'\bar{1}}^0 = v_{1'\bar{1}} + v_{1'1} g_1^0 \tilde{v}_{1\bar{1}}^0 \quad (\text{B.0.23})$$

$$g_{1'd}^0 = [(g_{1'}^0)^{-1} - v_{1'1} g_1^0 v_{11'}]^{-1} \quad (\text{B.0.24})$$

Substituindo a equação (B.0.21) na (B.0.19), obtém-se:

$$[1 - g_1^0 \tilde{v}_{1\bar{1}}^0 g_1^0 \tilde{v}_{1\bar{1}}^0] \tilde{g}_{1\bar{1}}^0 = g_1^0 + g_1^0 [v_{1\bar{1}'} + \tilde{v}_{1\bar{1}}^0 g_1^0 v_{11'}] \tilde{g}_{1'\bar{1}}^0,$$

ou

$$\tilde{g}_{\bar{1}\bar{1}}^0 = g_{\bar{1}d}^0 + g_{\bar{1}d}^0 \Sigma_{\bar{1}\bar{1}}^0 \tilde{g}_{\bar{1}'\bar{1}}^0, \quad (\text{B.0.25})$$

em que

$$\Sigma_{\bar{1}\bar{1}'}^0 = \Sigma_{\bar{1}'\bar{1}}^0, \quad (\text{B.0.26})$$

$$g_{\bar{1}d}^0 = [(g_{\bar{1}}^0)^{-1} - \tilde{v}_{\bar{1}\bar{1}}^0 g_{\bar{1}}^0 \tilde{v}_{\bar{1}\bar{1}}^0]^{-1}. \quad (\text{B.0.27})$$

Das relações (B.0.22) e (B.0.25), encontra-se:

$$[1 - g_{\bar{1}d}^0 \Sigma_{\bar{1}\bar{1}}^0 g_{\bar{1}'d}^0 \Sigma_{\bar{1}'\bar{1}}^0] \tilde{g}_{\bar{1}\bar{1}}^0 = g_{\bar{1}d}^0, \quad (\text{B.0.28})$$

ou

$$\tilde{g}_{\bar{1}\bar{1}}^0 = \dot{g}_{\bar{1}d}^0, \quad (\text{B.0.29})$$

na qual

$$\dot{g}_{\bar{1}d}^0 = [(g_{\bar{1}d}^0)^{-1} - \Sigma_{\bar{1}\bar{1}}^0 g_{\bar{1}'d}^0 \Sigma_{\bar{1}'\bar{1}}^0]^{-1} \quad (\text{B.0.30})$$

Substituindo o resultado (B.0.29) em (B.0.22) e estes em (B.0.21), obtêm-se todas relações da primeira coluna da matriz $\tilde{\mathbf{g}}^0$.

Na segunda coluna da matriz $\tilde{\mathbf{g}}^0$, as seguintes relações são obtidas:

$$\tilde{g}_{\bar{1}'\bar{1}'}^0 = g_{\bar{1}'}^0 + g_{\bar{1}'}^0 v_{\bar{1}'\bar{1}}^0 \tilde{g}_{\bar{1}\bar{1}'}^0 + g_{\bar{1}'}^0 \tilde{v}_{\bar{1}'\bar{1}}^0 \tilde{g}_{\bar{1}\bar{1}'}^0, \quad (\text{B.0.31})$$

$$\tilde{g}_{\bar{1}\bar{1}'}^0 = g_{\bar{1}}^0 v_{\bar{1}\bar{1}'}^0 \tilde{g}_{\bar{1}'}^0 + g_{\bar{1}}^0 \tilde{v}_{\bar{1}\bar{1}'}^0 \tilde{g}_{\bar{1}'}^0, \quad (\text{B.0.32})$$

$$\tilde{g}_{\bar{1}\bar{1}'}^0 = g_{\bar{1}}^0 v_{\bar{1}\bar{1}'}^0 \tilde{g}_{\bar{1}'}^0 + g_{\bar{1}}^0 \tilde{v}_{\bar{1}\bar{1}'}^0 \tilde{g}_{\bar{1}'}^0. \quad (\text{B.0.33})$$

Substituindo a relação (B.0.33) em (B.0.32),

$$\tilde{g}_{\bar{1}\bar{1}'}^0 = g_{\bar{1}d}^0 \Sigma_{\bar{1}\bar{1}}^0 \tilde{g}_{\bar{1}'}^0. \quad (\text{B.0.34})$$

Utilizando a relação (B.0.33) em (B.0.31),

$$\tilde{g}_{\bar{1}'}^0 = g_{\bar{1}'d}^0 + g_{\bar{1}'d}^0 \Sigma_{\bar{1}'\bar{1}}^0 \tilde{g}_{\bar{1}\bar{1}'}^0, \quad (\text{B.0.35})$$

sendo $g_{1'd}$ dada por:

$$g_{1'd}^0 = [(g_{1'}^0)^{-1} - \tilde{v}_{1'1}^0 g_{1'}^0 \tilde{v}_{11'}^0]^{-1}. \quad (\text{B.0.36})$$

Logo, o resultado para $g_{1'}^0$ é encontrado através da substituição de (B.0.34) em (B.0.35):

$$\tilde{g}_{1'}^0 = \dot{g}_{1'}^0, \quad (\text{B.0.37})$$

na qual

$$\dot{g}_{1'}^0 = [(g_{1'd}^0)^{-1} - \Sigma_{1'\bar{1}}^0 g_{1'd}^0 \Sigma_{\bar{1}1'}^0]^{-1}, \quad (\text{B.0.38})$$

Substituindo (B.0.37) em (B.0.34) e estes em (B.0.33), encontram-se todas relações da segunda coluna de $\tilde{\mathbf{g}}^0$.

Na terceira coluna de $\tilde{\mathbf{g}}^0$, as seguintes relações provenientes da equação de Dyson são encontradas:

$$\tilde{g}_1^0 = g_1^0 + g_1^0 v_{11'} \tilde{g}_{1'1}^0 + g_1^0 \tilde{v}_{1\bar{1}}^0 \tilde{g}_{\bar{1}1}^0, \quad (\text{B.0.39})$$

$$\tilde{g}_{1'1}^0 = g_{1'}^0 v_{1'\bar{1}} \tilde{g}_{\bar{1}1}^0 + g_{1'}^0 v_{1'1} \tilde{g}_1^0, \quad (\text{B.0.40})$$

$$\tilde{g}_{\bar{1}1}^0 = g_{\bar{1}}^0 v_{\bar{1}1'} \tilde{g}_{1'1}^0 + g_{\bar{1}}^0 \tilde{v}_{\bar{1}\bar{1}}^0 \tilde{g}_1^0. \quad (\text{B.0.41})$$

Substituindo (B.0.41) em (B.0.40), obtém-se:

$$\tilde{g}_{1'1}^0 = g_{1'e}^0 \Sigma_{1'1}^0 \tilde{g}_1^0, \quad (\text{B.0.42})$$

sendo

$$\Sigma_{1'1}^0 = \Sigma_{11'}^0 = v_{1'1} + v_{1'\bar{1}} g_{\bar{1}}^0 \tilde{v}_{\bar{1}1}^0 \quad (\text{B.0.43})$$

$$g_{1'e}^0 = [(g_{1'}^0)^{-1} - v_{1'\bar{1}} g_{\bar{1}}^0 v_{\bar{1}1'}^0]^{-1}, \quad (\text{B.0.44})$$

Utilizando (B.0.41) em (B.0.39), encontram-se:

$$\tilde{g}_1^0 = g_{1e}^0 + g_{1e}^0 \Sigma_{11'}^0 \tilde{g}_{1'1}^0, \quad (\text{B.0.45})$$

sendo

$$g_{1e}^0 = [(g_1^0)^{-1} - \tilde{v}_{\bar{1}\bar{1}}^0 g_{\bar{1}}^0 \tilde{v}_{\bar{1}1}^0]^{-1}. \quad (\text{B.0.46})$$

Assim, é encontrado o resultado para g_1^0 , através da substituição da (B.0.42) em (B.0.45):

$$\tilde{g}_1^0 = \dot{g}_{1e}^0, \quad (\text{B.0.47})$$

em que

$$\dot{g}_{1e}^0 = [(g_{1e}^0)^{-1} - \Sigma_{11'}^0 g_{1'e}^0 \Sigma_{1'1}^0]^{-1}. \quad (\text{B.0.48})$$

Através da relação de \tilde{g}_1^0 e das equações (B.0.42) e (B.0.41), podem-se encontrar explicitamente todos os termos da terceira coluna de $\tilde{\mathbf{g}}^0$.

As componentes da matriz $\tilde{\mathbf{g}}^1$ são encontradas trocando os supraíndices dos fônons (de 0 para 1) e os subíndices dos estados do poço (de 1' para 0') das componentes da matriz $\tilde{\mathbf{g}}^0$.

As funções de Green dos canais conectados são calculadas a partir da relação (B.0.3):

$$\mathbf{G} = \tilde{\mathbf{g}} + \tilde{\mathbf{g}} \mathbf{V}_{\bar{1}} \mathbf{G}, \quad (\text{B.0.49})$$

na qual \mathbf{G} e $\mathbf{V}_{\bar{1}}$ são matrizes simétricas dadas por blocos de matrizes de 3×3 .

$$\mathbf{G} = \begin{bmatrix} \mathbf{G}^{00} & \mathbf{G}^{01} \\ \mathbf{G}^{10} & \mathbf{G}^{11} \end{bmatrix}, \quad (\text{B.0.50})$$

$$\mathbf{V}_{\bar{1}} = \begin{bmatrix} \mathbf{0} & \mathbf{V}' \\ \mathbf{V}' & \mathbf{0} \end{bmatrix}, \quad (\text{B.0.51})$$

em que,

$$\mathbf{V}' = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & \gamma & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad (\text{B.0.52})$$

γ é a energia de interação do elétron-fônon encontrada na eq. (5.2.8).

As matrizes \mathbf{G}^{00} , \mathbf{G}^{10} e \mathbf{G}^{11} são dadas por:

$$\mathbf{G}^{00} = \begin{bmatrix} G_{\bar{1}\bar{1}}^0 & G_{\bar{1}1'}^0 & G_{\bar{1}1}^0 \\ G_{1'\bar{1}}^0 & G_{1'1'}^0 & G_{1'1}^0 \\ G_{1\bar{1}}^0 & G_{11'}^0 & G_{11}^0 \end{bmatrix}, \quad (\text{B.0.53})$$

$$\mathbf{G}^{10} = \begin{bmatrix} G_{\bar{1}\bar{1}}^{10} & G_{\bar{1}\bar{1}'}^{10} & G_{\bar{1}\bar{1}}^{10} \\ G_{0'\bar{1}}^{10} & G_{0'1'}^{10} & G_{0'1}^{10} \\ G_{\bar{1}\bar{1}}^{10} & G_{\bar{1}\bar{1}'}^{10} & G_{\bar{1}\bar{1}}^{10} \end{bmatrix}, \quad (\text{B.0.54})$$

$$\mathbf{G}^{11} = \begin{bmatrix} G_{\bar{1}\bar{1}}^1 & G_{\bar{1}0'}^1 & G_{\bar{1}\bar{1}}^1 \\ G_{0'\bar{1}}^1 & G_{0'0'}^1 & G_{0'1}^1 \\ G_{\bar{1}\bar{1}}^1 & G_{\bar{1}0'}^1 & G_{\bar{1}\bar{1}}^1 \end{bmatrix}, \quad (\text{B.0.55})$$

A matriz \mathbf{G}^{01} é igual a transposta da matriz \mathbf{G}^{10} , em termos de coordenadas, $G_{ij}^{01} = G_{ji}^{10}$. Da relação (B.0.49), os seguintes resultados para os blocos de matrizes são encontrados:

$$\mathbf{G}^{00} = \tilde{\mathbf{g}}^0 + \tilde{\mathbf{g}}^0 \mathbf{V}' \mathbf{G}^{10}, \quad (\text{B.0.56})$$

$$\mathbf{G}^{11} = \tilde{\mathbf{g}}^1 + \tilde{\mathbf{g}}^1 \mathbf{V}' \mathbf{G}^{01}, \quad (\text{B.0.57})$$

$$\mathbf{G}^{10} = \tilde{\mathbf{g}}^1 \mathbf{V}' \mathbf{G}^{00}, \quad (\text{B.0.58})$$

em termos das coordenadas, obtém-se as seguintes relações para a primeira coluna \mathbf{G} :

$$G_{\bar{1}\bar{1}}^0 = \tilde{g}_{\bar{1}\bar{1}}^0 + \tilde{g}_{\bar{1}\bar{1}'}^0 \gamma G_{0'\bar{1}}^{10}, \quad (\text{B.0.59})$$

$$G_{1'\bar{1}}^0 = \tilde{g}_{1'\bar{1}}^0 + \tilde{g}_{1'0'}^0 \gamma G_{0'\bar{1}}^{10}, \quad (\text{B.0.60})$$

$$G_{\bar{1}\bar{1}}^0 = \tilde{g}_{\bar{1}\bar{1}}^0 + \tilde{g}_{\bar{1}\bar{1}'}^0 \gamma G_{0'\bar{1}}^{10}, \quad (\text{B.0.61})$$

$$G_{\bar{1}\bar{1}}^{10} = \tilde{g}_{\bar{1}0'}^1 \gamma G_{1'\bar{1}}^0 \quad (\text{B.0.62})$$

$$G_{0'\bar{1}}^{10} = \tilde{g}_{0'}^1 \gamma G_{1'\bar{1}}^0 \quad (\text{B.0.63})$$

$$G_{\bar{1}\bar{1}}^{10} = \tilde{g}_{\bar{1}0'}^1 \gamma G_{1'\bar{1}}^0, \quad (\text{B.0.64})$$

O processo de dizimação é utilizado novamente para-se encontrar as relações de \mathbf{G} , dessa forma, substituindo a equação (B.0.63) na (B.0.60), obtém-se:

$$G_{1'\bar{1}}^0 = \tilde{g}_{1'\bar{1}}^0 [1 - \tilde{g}_{1'1}^0 \gamma \tilde{g}_{0'}^1 \gamma]^{-1}. \quad (\text{B.0.65})$$

Substituindo (B.0.65) nas expressões (B.0.62), (B.0.63) e (B.0.64), encontram-se os resultados para $G_{\bar{1}\bar{1}}^{10}$, $G_{0'1}^{10}$ e $G_{\bar{1}\bar{1}}^{10}$. A partir de $G_{0'1}^{10}$ e das relações (B.0.59), (B.0.60) e (B.0.61), obtêm-se os resultados para $G_{\bar{1}\bar{1}}^0$, $G_{1'1}^0$, $G_{\bar{1}\bar{1}}^{10}$, respectivamente.

Os termos da segunda coluna de \mathbf{G} são dados por:

$$G_{\bar{1}\bar{1}'}^0 = \tilde{g}_{\bar{1}\bar{1}'}^0 + \tilde{g}_{\bar{1}\bar{1}'}^0 \gamma G_{0'1'}^{10}, \quad (\text{B.0.66})$$

$$G_{1'1'}^0 = \tilde{g}_{1'1'}^0 + \tilde{g}_{1'1'}^0 \gamma G_{0'1'}^{10}, \quad (\text{B.0.67})$$

$$G_{\bar{1}\bar{1}'}^0 = \tilde{g}_{\bar{1}\bar{1}'}^0 + \tilde{g}_{\bar{1}\bar{1}'}^0 \gamma G_{0'1'}^{10}, \quad (\text{B.0.68})$$

$$G_{\bar{1}\bar{1}'}^{10} = \tilde{g}_{\bar{1}\bar{1}'}^1 \gamma G_{1'1'}^0, \quad (\text{B.0.69})$$

$$G_{0'1'}^{10} = \tilde{g}_{0'1'}^1 \gamma G_{1'1'}^0, \quad (\text{B.0.70})$$

$$G_{\bar{1}\bar{1}'}^{10} = \tilde{g}_{\bar{1}\bar{1}'}^1 \gamma G_{1'1'}^0. \quad (\text{B.0.71})$$

Substituindo (B.0.70) em (B.0.67), obtêm-se:

$$G_{1'1'}^0 = \tilde{g}_{1'1'}^0 [1 - \tilde{g}_{1'1'}^0 \gamma \tilde{g}_{0'1'}^1 \gamma]^{-1} \quad (\text{B.0.72})$$

Substituindo a eq. (B.0.72) nas expressões (B.0.71), (B.0.70) e (B.0.69), encontram-se $G_{\bar{1}\bar{1}'}^{10}$, $G_{0'1'}^{10}$ e $G_{\bar{1}\bar{1}}^{10}$. Substituindo novamente $G_{0'1'}^{10}$ em (B.0.68) e (B.0.66), obtêm-se os resultados da segunda coluna de \mathbf{G} .

Na terceira coluna de \mathbf{G} é dada por:

$$G_{\bar{1}\bar{1}}^0 = \tilde{g}_{\bar{1}\bar{1}}^0 + \tilde{g}_{\bar{1}\bar{1}}^0 \gamma G_{0'1}^{10}, \quad (\text{B.0.73})$$

$$G_{1'1}^0 = \tilde{g}_{1'1}^0 + \tilde{g}_{1'1}^0 \gamma G_{0'1}^{10}, \quad (\text{B.0.74})$$

$$G_{\bar{1}\bar{1}}^0 = \tilde{g}_{\bar{1}\bar{1}}^0 + \tilde{g}_{\bar{1}\bar{1}}^0 \gamma G_{0'1}^{10}, \quad (\text{B.0.75})$$

$$G_{\bar{1}\bar{1}}^{10} = \tilde{g}_{\bar{1}\bar{1}}^1 \gamma G_{1'1}^0, \quad (\text{B.0.76})$$

$$G_{0'1}^{10} = \tilde{g}_{0'1}^1 \gamma G_{1'1}^0, \quad (\text{B.0.77})$$

$$G_{11}^{10} = \tilde{g}_{10'}^1 \gamma G_{1'1}^0. \quad (\text{B.0.78})$$

Substituindo (B.0.77) em (B.0.75), obtém-se:

$$G_{1'1}^0 = \tilde{g}_{1'1}^0 [1 - \tilde{g}_{1'}^0 \gamma \tilde{g}_{0'}^1]^{-1}. \quad (\text{B.0.79})$$

Através das substituições da eq. (B.0.79) nas expressões (B.0.76), (B.0.77) e (B.0.78) e de (B.0.77) em (B.0.73) e (B.0.74), os resultados da segunda coluna de \mathbf{G} são obtidos.

As componentes da quarta coluna de \mathbf{G} são dada por:

$$G_{11}^{01} = G_{11}^{10}, \quad (\text{B.0.80})$$

$$G_{1'1}^{01} = G_{1'1}^{10}, \quad (\text{B.0.81})$$

$$G_{11}^{01} = G_{11}^{10}, \quad (\text{B.0.82})$$

$$G_{11}^1 = \tilde{g}_{10'}^1 + \tilde{g}_{10'}^1 \gamma G_{1'1}^{01}, \quad (\text{B.0.83})$$

$$G_{0'1}^1 = \tilde{g}_{1'1}^1 + \tilde{g}_{1'0'}^1 \gamma G_{1'1}^{01}, \quad (\text{B.0.84})$$

$$G_{11}^1 = \tilde{g}_{11}^1 + \tilde{g}_{10'}^1 \gamma G_{1'1}^{01}. \quad (\text{B.0.85})$$

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

$$G_{10'}^{01} = G_{0'1}^{10}, \quad (\text{B.0.86})$$

$$G_{1'0'}^{01} = G_{0'1'}^{10}, \quad (\text{B.0.87})$$

$$G_{10'}^{01} = G_{10'}^{01}, \quad (\text{B.0.88})$$

$$G_{10'}^1 = \tilde{g}_{10'}^1 + \tilde{g}_{10'}^1 \gamma G_{1'0'}^{01}, \quad (\text{B.0.89})$$

$$G_{0'0'}^1 = \tilde{g}_{0'0'}^1 + \tilde{g}_{0'0'}^1 \gamma G_{1'0'}^{01}, \quad (\text{B.0.90})$$

$$G_{10'}^1 = \tilde{g}_{10'}^1 + \tilde{g}_{10'}^1 \gamma G_{1'0'}^{01}, \quad (\text{B.0.91})$$

Finalmente as componentes da última coluna de \mathbf{G} são dadas por:

$$G_{11}^{01} = G_{11}^{10}, \quad (\text{B.0.92})$$

$$G_{1'1}^{01} = G_{1'1}^{10}, \quad (\text{B.0.93})$$

$$G_{11}^{01} = G_{11}^{10}, \quad (\text{B.0.94})$$

$$G_{11}^1 = \tilde{g}_{11}^1 + \tilde{g}_{10'}^1 \gamma G_{1'1}^{01}, \quad (\text{B.0.95})$$

$$G_{0'1}^1 = \tilde{g}_{0'1}^1 + \tilde{g}_{0'0'}^1 \gamma G_{1'1}^{01}, \quad (\text{B.0.96})$$

$$G_{11}^1 = \tilde{g}_1^1 + \tilde{g}_{10'}^1 \gamma G_{1'3}^{01}. \quad (\text{B.0.97})$$

REFERÊNCIAS

- [1] H. Haken, Quantum Field Theory of Solids, an Introduction, North-Holland, Amsterdam, pág 218, (1976).
- [2] E. V. Anda, S. S. Makler, H. M. Pastawski and R. G. Barreira, Braz J. of Phys., **24**, 330, 1994.
- [3] F. Capasso e S. Datta, Phys. Today, **43**, 74, (1990).
- [4] L. L. Chang, L. Esaki e R. Tsu., Appl. Phys. Lett., **24**, 593, (1974).
- [5] F. Delyon, Y. Levy and B. Souillard, Phys. Rev. Lett. **57**, 2010 (1987).
- [6] V. J. Goldman, D. C. Tsui e J. E. Cunningham, Phys. Rev. B, **36**, 7635, (1987).
- [7] V. J. Goldman, D. C. Tsui e J. E. Cunningham, Phys. Rev. Lett., **58**, 1256, (1987).
- [8] C. W. J. Beenakker and H. Van Houten, Solid State Phys., **44**, 1, (1991).
- [9] R. Landauer, Phys. Lett. **85A**, 91, (1981).
- [10] M. Buttiker, Phys. Rev. Lett. **57**, 1761, (1986).
- [11] Keldysh L. V., Soviet Phys. JETP no. **4**, 1018, (1965).
- [12] E. V. Anda and F. Flores, J. Phys. Condens. Matter **3**, 9087, (1991).
- [13] L. P. Kadanoff, G. Baym, Quantum Statistical Mechanics, Green's Function Methods in Equilibrium and Nonequilibrium Problems, Benjamin Cummings Publishing Company, (1962).
- [14] Y. Meir e N. S. Wingreen, Phys. Rev. Lett. **68**, 2512, (1992).
- [15] A. P. Jauho, N. S. Wingreen, e Y. Moir, Phys. Rev. B **50**, 5528, (1994).
- [16] S. S. Makler, M. I. Vasilevski, E. V. Anda, D. E. Tugarot, J. Weberszpil and H. M. Pastawski, J. Phys. Condens. Matter, vol **10**, 5905, (1998).
- [17] I. Camps, S. S. Makler, H. M. Pastawski and L. E. F. Foa Torres, Phys. Rev. B, vol. **64**, 125311, (2001).
- [18] Jonson M., Phys. Rev. B, **39**, 5924 (1989).
- [19] Lake R., Klineck G. and Datta S., Phys. Rev. B **47**, 6427 1993.
- [20] C. L. Tang, Phys. Rev., **134**, A116, (1964).
- [21] E. B. Tucker, Phys. Rev. Lett., **6**, 547, (1961).

- [22] J. A. Giordmaine e W. Kaiser, *Phys. Rev.*, **144**, 676, (1966).
- [23] J. Y. Prieur, R. Höhler, J. Joffrin e M. Devaud, *Europhys. Lett.*, **24**, 409, (1993).
- [24] J. Y. Prieur, M. Devaud, J. Joffrin, C. Barre e M. Stenger, *Physica B*, **220**, 235, (1996).
- [25] P. Basseras, S. M. Gracewski, G. W. Wicks e R. J. D. Miller, *J. Appl. Phys.*, **75**, 2761, (1994).
- [26] R. Merlin, *Solid State Commun.* **102**, 207, (1997).
- [27] E. P. N. Damen, A. F. M. Arts e H. W. de Wijn, *Phys. Rev. Lett.*, **74**, 4249, (1995).
- [28] S. T. Zavtrak, *Phys. Rev. E*, **51**, 2480, (1995).
- [29] S. T. Zavtrak, *Phys. Rev. E*, **51**, 3767, (1995).
- [30] S. T. Zavtrak, *Zh. Tekh. Fiz.*, **65**, 123, (1995).
- [31] S. T. Zavtrak, *J. Acoust. Soc. Amer.*, **99**, 730, (1996).
- [32] A. A. Doinikov e S. T. Zavtrak, *J. Acoust. Soc. Amer.*, **99**, 3849, (1996).
- [33] S. T. Zavtrak e I. V. Volkov, *Tech. Phys.*, **42**, 406, (1997).
- [34] P. A. Fokker, J. I. Dijkhuis e H. W. de Wijn, *Phys. Rev. B*, **55**, 2925, (1997).
- [35] P. A. Fokker, R. S. Meltzer, Y. P. Wang, J. I. Dijkhuis e H. W. de Wijn, *Phys. Rev. B*, **55**, 2934, (1997).
- [36] B. A. Glavin, V. A. Kochelap, T. L. Linnik, K.W. Kim, and M. A. Stroscio, *Phys. Rev. B* **65**, 085303 (2002).
- [37] B. A. Glavin, V. A. Kochelap, T. L. Linnik, K. W. Kim, and M. A. Stroscio, *Phys. Rev. B*, **65**, 085304, (2002).
- [38] A. J. Kent, R. N. Kini, N. M. Stanton, M. Henini, B. A. Glavin, V. A. Kochelap, and T. L. Linnik, *Phys. Rev. Lett.* **96**, 215504, (2006).
- [39] B. Jusserand, F. Mallot, J. M. Moison and G. Leroux, *Appl. Phys. Lett.*, **57**, 560, (1990).
- [40] J. M. Jacob, D. M. Kim, A. Bouchalkha, J. J. Sony, J. F. Klem, H. Hou, C. W. Tu e H. Morkoç, *Sol. State Comm.*, **91**, 721, (1994).
- [41] Fabrice Vallée, *Phys. Rev. B*, **49**, 2460, (1994).
- [42] R. G. Ulbrich, in *Nonequilibrium Phonon Dynamics*, **24** of NATO Advanced Study Institute, Series B: Physics, edited by W. E. Bron (Plenum, New York, 1984).
- [43] R. G. Ulbrich, V. Narayanamurty, and M. A. Chin, *Phys. Rev. Lett.*, **45**, 17. 1432, (1980).
- [44] Z. L. Yu e S. Boseck, *Scanning acoustic microscopy and its applications to material characterization*, *Rev. Mod. Phys.*, vol. 67, no. 4, pp. 863 - 891, Oct. 1995.
- [45] R. S. Gilmore, *Industrial ultrasonic imaging and microscopy*, *J. Phys. D: Appl. Phys.*, vol. **29**, no. 6, pp. 1389 - 1417, Jun. 1996.

- [46] H. Maris, Picosecond ultrasonic, *Sci. Am.*, 64, Jan. 1998.
- [47] C. Barras, Most powerful ‘sound laser’ to shake up acoustics, *New Sci.*, Jun. 2009.
- [48] M. E. Msall, A. Klimashov, S. Kronmüller, H. Kostial, W. Dietsche e K. Friedland, *Appl. Phys. Lett.*, **74**, 821, (1999).
- [49] J. P. Wolfe, *Imaging Phonons: Acoustic Wave Propagation in Solids*, Cambridge University Press, Cambridge, (1998).
- [50] N. W. Ascroft, Mermin N. David, *Solids States Physics*, Plenum, pág 187, (1993).
- [51] G.D. Mahan, *Many Particle Physics*, Plenum Press, New York, pág 88, (1990).
- [52] J. Rammer, H. Smith, *Rev. Mod. Phys.*, **58**, 323 (1986).
- [53] R. J. Craig, *Math. Phys.* **9**, 605, (1968).
- [54] G.D. Mahan, *ibidem*, pág 123.
- [55] D. C. Langreth, *Linear and Nonlinear Electron Transport in Solids*, ed. J. T. Desvree e E Van Doren, Plenum, New York, (1976).
- [56] Haug H., Jauho A. P., *ibidem*, pág 68.
- [57] H. Haug, A. P. Jauho, *Quantum Kinetics in Transports and Optics of Semiconductors*, Springer, pág 71, (1996).
- [58] G.D. Mahan, *ibidem*, pág 140.
- [59] G.D. Mahan, *ibidem*, pág 120.
- [60] C. Kittel, *Quantum Theory of Solids*, John Wiley & Sons, Inc., pág 130, 1963.
- [61] Ziman J. M., *Principle of the Theory of Solids*, Cambridge University Press 1986, pág. 173.
- [62] O. Mandelung, *Introduction to Solids State Theory*, Springer Verlag Berlin Heidelberg New York, 1978, pág 183.
- [63] Fröhlich, H. *Advances in Phys.* **3**, 325, (1954).
- [64] H. Haken, *ibidem*, pág 211.
- [65] F. Vallée, F. Bogani, *Phys. Rev. B*, **43**, 12049, (1991).
- [66] C. Trallero Giner and F. Comas, *Phys. Rev. B*, **37**, 4583, (1988).
- [67] Diana E. Tuyarot de Barci, *Tunelamento Ressonante e Geração de Som Coerente*, Tese de doutorado, Instituto de Física. Universidade Federal Fluminense, 1996.
- [68] José Weberszpil, *Dinâmica de um gerador de fônons coerentes (SASER)*, Tese de doutorado, Instituto de Física. Universidade Federal Fluminense, 1997.
- [69] J. J. Licari, R. Evrad, *Phys. Rev. B*, **15**, 2254, (1977).

- [70] B. Jusserand, F. Mollot, J.-M. Moison, and G. L. Roux, *Appl. Phys. Lett.* **57**, pp 560-563, (1990).
- [71] A. M. Paula, A. C. Maciel, G. Weber, J. F. Ryan, P. Dawson and C. T. Foxon, *Semicond. Sci. Technol.*, **7**, (8120).
- [72] I. S. Grudin, H. Lee, O. Painter, K. J. Vahala, Phonon Laser Action in a Tunable Two-Level System , *Phys. Rev. Lett.*, **104**, 083901, (2010).