UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
INSTITUTO DE FÍSICA DE SÃO CARLOS

FELIPE CAMPOS PENHA

Efeitos de canais inelásticos no transporte eletrônico:
um exemplo além do formalismo de Landauer

São Carlos

2012

FELIPE CAMPOS PENHA

Efeitos de canais inelásticos no transporte
eletrônico: um exemplo além do formalismo
de Landauer

Dissertação apresentada ao Programa de
Pós-Graduação em Física do Instituto de
Física de São Carlos da Universidade de São
Paulo, para obtenção do título de Mestre em
Ciências.

Área de concentração: Física Básica
Orientador: Prof. Dr. José Carlos Egues

Versão corrigida

(versão original disponível na Unidade que aloja o Programa)

São Carlos

2012

AUTORIZO A REPRODUÇÃO E DIVULGAÇÃO TOTAL OU PARCIAL DESTE TRABALHO, POR QUALQUER MEIO CONVENCIONAL OU ELETRÔNICO PARA FINS DE ESTUDO E PESQUISA, DESDE QUE CITADA A FONTE.

Ficha catalográfica elaborada pelo Serviço de Biblioteca e Informação do IFSC,
com os dados fornecidos pelo(a) autor(a)

Penha, F. C.

Efeitos de canais inelásticos no transporte eletrônico: um exemplo além do formalismo de Landauer / F. C. Penha; orientador José Carlos Egues - versão corrigida -- São Carlos, 2012.
117 p.

Dissertação (Mestrado - Programa de Pós-Graduação em Física Básica) -- Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, 2012.

1. Transporte eletrônico. 2. Formalismo de Landauer. 3. Espalhamento inelástico. 4. Ressonância de Fano. 5. Estados quasi-estacionários. I. Egues, José Carlos, orient. II. Título.

FOLHA DE APROVAÇÃO

À MEMÓRIA DE MINHA AVÓ,

Maria da Conceição Penha (1922-2008).

AGRADECIMENTOS

Agradeço a todos do círculo pessoal: meus pais, meu irmão e outros membros mais próximos da família, por todo o apoio; aos amigos, pelas horas de estudo e lazer e à minha namorada, Bruna, pelo amor e apoio nos últimos meses de mestrado. No círculo profissional: a todos os alunos e professores do grupo de pesquisa em São Carlos e em Basel. Em especial, ao prof^o Carlos Egues, que me deu inúmeras oportunidades de crescimento pessoais e profissionais.

Este trabalho foi financiado por CAPES e CNPq e feito em colaboração com Fabio Pedrocchi, Beat Röthlisberger e Daniel Loss, da Universidade de Basel, na Suíça.

“Aquele que quer aprender a voar um dia precisa primeiro aprender a ficar de pé, caminhar, correr, escalar e dançar; ninguém consegue voar só aprendendo voo.”

FRIEDRICH NIETZSCHE (1844-1900)

RESUMO

PENHA, F. C. **Efeitos de canais inelásticos no transporte eletrônico:** um exemplo além do formalismo de Landauer. 2012. 117 p. Dissertação (Mestrado em Ciências) - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2012.

Neste trabalho, estudamos a influência de canais de espalhamento inelástico no transporte eletrônico. Primeiramente, expomos o formalismo de Landauer usual para o cálculo da corrente elétrica em sistemas em que o espalhamento é puramente elástico. Como exemplo, calculamos a corrente para um potencial delta de Dirac a partir de suas probabilidades de transmissão. A amostra correspondente é aquela de uma camada muito fina com impurezas (não-magnéticas) contida em uma heteroestrutura semicondutora. Mostramos que a distorção do potencial quântico devido à voltagem aplicada pode ser desprezada no cálculo da corrente elétrica, abaixo da energia de Fermi do emissor. Subsequentemente, acoplamos o potencial delta a um oscilador harmônico quântico para modelar a presença de fônons no sistema. Encontramos modos inelásticos de transmissão que se tornam acessíveis para energias cada vez maiores, múltiplas do quantum $\hbar\omega$. Devido à conservação de probabilidade, a abertura de cada novo canal corresponde a “bicos” nas probabilidades de transmissão dos modos abaixo deste, em função da energia de incidência do elétron. No caso de uma delta atrativa, ressonâncias assimétricas com perfil de Fano são observadas. Adaptamos o formalismo de Landauer, incluindo canais inelásticos independentes. Seguindo um trabalho anterior de Emberly e Kirczenow (2000), mostramos que existe uma forma de se levar em conta possíveis coincidências nos estados de espalhamento finais aplicando o princípio de exclusão de Pauli. Isto leva as distribuições dos estados de espalhamento a estarem fora de equilíbrio, já que dependem umas das outras. Resolvendo o problema auto-consistentemente, somos capazes de obter a corrente elétrica a partir das probabilidades de transmissão do potencial quântico. Nossos resultados demonstram que as ressonâncias de Fano do potencial atrativo dão origem a uma diminuição da inclinação da corrente elétrica contra a voltagem aplicada, já que elétrons são “presos” ao potencial por um tempo finito. Mostramos este efeito num regime de voltagens baixas em comparação com a energia de Fermi, para o qual desprezamos a distorção do potencial quântico devido à voltagem aplicada. Além disso, uma comparação com os resultados do formalismo de Landauer mostra que uma discrepância significativa é observada para o caso de o oscilador estar inicialmente excitado e fortemente acoplado ao elétron.

Palavras-chave: Transporte eletrônico. Formalismo de Landauer. Espalhamento inelástico. Ressonância de Fano. Estados quasi-estacionários.

ABSTRACT

PENHA, F. C. **Effects of inelastic channels in electronic transport:** an example beyond the Landauer formalism. 2012. 117 p. Dissertação (Mestrado em Ciências) - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2012.

In this work, we study the influence of inelastic scattering channels in electronic transport. We first present the usual Landauer formalism, for calculating the electric current in systems where the scattering is purely elastic. As an example, we calculate the current for a Dirac delta potential from its transmission probabilities. The corresponding sample is that of a very thin layer with (non-magnetic) impurities within a semiconductor heterostructure. We show that the distortion of the quantum potential due to the applied voltage can be ignored in the calculation of an electric current below the Fermi energy of the emitter. Then we couple the delta potential to a quantum harmonic oscillator to model the presence of phonons in the system. We find inelastic transmission modes that become available for increasing energies, multiple of the quantum $\hbar\omega$. Due to conservation of probability, the opening of each new channel corresponds to “kinks” in the transmission probabilities of lower modes as a function of the energy of the impinging electrons. In the case of an attractive delta potential, asymmetric resonances with a Fano-like profile are observed. We adapt the Landauer formalism by including the independent inelastic channels. Following a previous work by Emberly and Kirczenow (2000), we show that there is a way to take into account the possible coincidences in the final scattering states using Pauli’s exclusion principle. This causes the distributions of the scattering states to be out of equilibrium, as they depend on each other. Solving the problem self-consistently, we are able to obtain the electric current from the transmission probabilities of the quantum potential. Our results demonstrate that the Fano resonances of the attractive potential gives rise to a decrease of the slope in the electric current versus the applied voltage, as the electrons are “trapped” in the potential for a finite amount of time. We have shown this effect in a low voltage regime with respect to the Fermi energy, for which we ignore the distortion of the quantum potential due to the applied voltage. Furthermore, a comparison with the results from the Landauer formalism shows that a significant discrepancy is seen for the oscillator initially in its excited mode and strongly coupled to the electron.

Keywords: Electronic transport. Landauer formalism. Inelastic scattering. Fano resonance. Quasi-stationary states.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1.1 - Amplitudes de M modos à direita da amostra e N à esquerda. a 's são amplitudes de ondas que vão em direção ao centro espalhador e b 's amplitudes que vão na direção contrária.	25
Figura 1.2 - Resultados obtidos por van Wees <i>et al.</i> ¹⁴ demonstrando o aparecimento de degraus devido aos canais de propagação discretos em <i>quantum point contacts</i>	26
Figura 1.3 - Ilustração mostrando a correspondência entre a amostra real de interesse (camada B da heteroestrutura) deste trabalho e o seu potencial modelo.	28
Figura 1.4 - Perfis de Fano para $\varepsilon_r = 0$ e diferentes limites do parâmetro de assimetria, q	30
Figura 2.1 - Sistema considerado no formalismo de Landauer: uma amostra a ser modelada por um potencial quântico posicionada entre dois terminais, L e R , cuja diferença de potencial é eV	34
Figura 2.2 - Potencial genérico $V(x)$ que descreve a amostra, no contexto do formalismo de Landauer, e as distribuições de elétrons à esquerda ($x \leq -d/2$) e à direita ($x \geq d/2$). Omitimos aqui o potencial confinante nas direções y e z	37
Figura 2.3 - Possíveis caminhos fechados da integral contida na Eq.(2.74) no plano complexo e os pólos das soluções (+) e (-).	51
Figura 2.4 - Probabilidades de transmissão e reflexão contra a energia de incidência longitudinal do elétron.	53
Figura 2.5 - Perfil do potencial quântico composto por uma delta de Dirac sobreposto a um potencial degrau.	55

Figura 2.6 - Probabilidade de transmissão da esquerda para a direita ($L \rightarrow R$) contra a energia de incidência longitudinal do elétron. Neste caso, estamos imaginando uma diferença de potencial entre os dois lados de eV	56
Figura 2.7 - Distribuições de elétrons nos dois lados do potencial delta de Dirac, com $eV < \varepsilon_F$	57
Figura 2.8 - Esquema das distribuições de elétrons nos dois lados do potencial delta de Dirac similar ao da Fig.(2.7), mas com $eV > \varepsilon_F$	58
Figura 2.9 - Curvas da probabilidade de transmissão <i>versus</i> eV (em unidades da intensidade do potencial delta) através de um potencial quântico composto pela delta de Dirac sobreposta a um potencial degrau. . .	60
Figura 2.10 - Curvas da corrente elétrica <i>versus</i> eV através de um potencial quân- tico composto pela delta de Dirac sobreposta a um potencial degrau.	61
Figura 2.11 - Curvas da corrente elétrica <i>versus</i> eV menor que a energia de Fermi.	62
Figura 3.1 - Probabilidade de transmissão através do potencial repulsivo <i>versus</i> a energia de incidência do elétron em unidades do parâmetro μ . Escolhemos o oscilador harmônico inicialmente no modo $J = 0$	71
Figura 3.2 - Probabilidade de transmissão através do potencial repulsivo <i>versus</i> a energia de incidência do elétron em unidades do parâmetro μ . Escolhemos o oscilador harmônico inicialmente no modo $J = 1$	72
Figura 3.3 - Versão atrativa ($\mu = - \mu $) da Fig.(3.1), com $J = 0$	74
Figura 3.4 - Diagrama da energia total, para o oscilador harmônico inicialmente em $J = 0$. Estamos ignorando o acoplamento entre o potencial delta de Dirac e a coordenada harmônica.	75
Figura 3.5 - Versão atrativa ($\mu = - \mu $) da Fig.(3.2), com $J = 1$	77
Figura 3.6 - Diagrama semelhante àquele da Fig.(3.4), porém com $J = 1$. Aqui, o espectro contínuo começa em $\hbar\omega$, pois abaixo disso o modo incidente é evanescente.	78
Figura 4.1 - Distribuições de não-equilíbrio de cada estado de espalhamento com energia final coincidindo com a energia do estado de espalhamento elástico $\{1 \rightarrow 1, L \rightarrow R\}$	86
Figura 5.1 - No quadro superior: comparação entre o produto $T^{0 \rightarrow 0} F_L$ (em ver- melho) e a soma das distribuições de não-equilíbrio relacionadas com a transmissão ($L \rightarrow R$), em que o oscilador harmônico está ini- cialmente parado ($J = 0$). No quadro inferior: soma dos modos inelásticos.	95

Figura 5.2 - No quadro superior: comparação entre o produto $T^{3 \rightarrow 3} F_L$ (em vermelho) e a soma das distribuições de não-equilíbrio relacionadas com a transmissão ($L \rightarrow R$), em que o oscilador harmônico está inicialmente em seu terceiro modo excitado ($J = 3$). No quadro inferior: soma dos modos inelásticos.	95
Figura 5.3 - Esquema das populações de elétrons nos lados direito e esquerdo do potencial delta de Dirac, sem e com a aplicação de diferença de potencial.	97
Figura 5.4 - Efeito na corrente elétrica total do cruzamento com o nível da ressonância de Fano, para o oscilador inicialmente no modo $J = 0$ e diferentes valores do acoplamento γ em unidades de $ \mu $	99
Figura 5.5 - Ajuste da corrente elástica, através da expressão da Eq.(5.8), na região em que os estados quasi-estacionários são acessíveis.	100
Figura 5.6 - Comparação entre resultados da corrente elétrica obtidos pelo método auto-consistente e o formalismo de Landauer.	101

SUMÁRIO

1	Introdução	23
1.1	Formalismo de Landauer	24
1.2	Potencial Quântico Estudado	27
1.3	Ressonâncias de Fano	29
1.4	Organização da Dissertação e Resultados	31
2	Formalismo de Landauer	33
2.1	Sistema Considerado no Formalismo	34
2.2	Dedução em Primeira Quantização	35
2.3	Dedução em Segunda Quantização	43
2.4	Exemplo - O Potencial Delta de Dirac	48
2.4.1	Espalhamento Através do Potencial Delta de Dirac	48
2.4.2	Discussão para o Caso em que Há Voltagem Aplicada	54
2.4.3	Cálculo da Corrente Elétrica	56
3	Potencial Delta de Dirac Acoplado a uma Coordenada Harmônica	63
3.1	Hamiltoniano	64
3.2	Método Para o Cálculo das Amplitudes	66
3.3	Condição de Convergência	67
3.4	Potencial Repulsivo	70
3.5	Potencial Atrativo e Processos Virtuais	73
4	Cálculo da Corrente Elétrica no Caso de Espalhamento Inelástico	79
4.1	Formalismo de Landauer - Adaptação para o Espalhamento Inelástico . . .	80
4.2	Método Auto-Consistente	85

4.2.1	Introdução	85
4.2.2	Distribuições de não-equilíbrio e cálculo da corrente elétrica	88
5	Resultados - Distribuições de Não-Equilíbrio e Corrente Elétrica	93
5.1	Distribuições de Não-Equilíbrio	94
5.2	Corrente Elétrica	96
5.2.1	Evidências de Estados Quasi-Estacionários na Corrente Elétrica . .	96
5.2.2	Comparação com o Formalismo de Landauer	99
6	Conclusões	103
	REFERÊNCIAS	106
	Apêndice	112

CAPÍTULO 1

Introdução

Neste capítulo introdutório, primeiramente estudaremos o formalismo de Landauer¹ e seu desenvolvimento histórico². Este formalismo nos servirá como base para o cálculo da corrente elétrica em sistemas em que uma amostra é posicionada entre dois reservatórios de elétrons com potenciais químicos distintos. Para isso, é necessário modelar a amostra como um potencial quântico do qual é possível se extrair as probabilidades de transmissão. Até os dias de hoje, o formalismo de Landauer é utilizado e existe um interesse constante em se estudar propriedades elétricas de diversos sistemas, que vão muito além de uma amostra condutora ligada a terminais. Por exemplo, a condutância eletrônica através de condensados de Bose-Einstein³, átomos frios⁴, cadeias de DNA⁵ e grafeno⁶. Posteriormente, apresentaremos o potencial quântico estudado neste trabalho e sua amostra correspondente, através do qual desejamos estudar o espalhamento: o potencial delta de Dirac acoplado a uma coordenada harmônica. Este acoplamento adicionará canais inelásticos ao processo de espalhamento. Em especial, no caso da delta atrativa, existe a possibilidade de o elétron cair em um estado quasi-estacionário, que aparece no espectro da probabilidade de transmissão na forma de uma ressonância de Fano. Estudaremos brevemente este tipo de ressonância e, por fim, falaremos sobre a organização desta dissertação.

1.1 Formalismo de Landauer

Desde a década de 80, quando surgiu a possibilidade de se fabricar dispositivos eletrônicos de tamanho reduzido, na chamada escala mesoscópica*, existe um grande interesse no cálculo da corrente elétrica (ou da condutância, em resposta linear) e do ruído em tais dispositivos. Nessa época, a fórmula de Landauer¹, então pouco explorada, tornou-se fundamental para tal cálculo; fazendo a conexão com as probabilidades de transmissão através de um potencial quântico modelo. Esta fórmula, em sua forma original, nos diz que a condutância de uma amostra entre dois reservatórios de elétrons seria proporcional à razão entre a probabilidade de transmissão T e a probabilidade de reflexão $1 - T$:

$$G = \frac{e^2}{h} \frac{T}{1 - T}. \quad (1.1)$$

Esta fórmula é erroneamente atribuída ao trabalho precursor de 1957, como afirma o próprio autor em comentário de sua republicação em 1996⁸. No artigo de 1957, Rolf Landauer apresentava seu estudo sobre a variação dos campos na presença de um espalhador localizado, além de introduzir a ideia comum aos engenheiros elétricos da dualidade entre fontes de corrente e de potencial. Somente muitos anos depois⁹, em 1970, Rolf Landauer iria dar forma a esta última ideia através da Eq.(1.1). Deste modo, ele mostrou que os portadores injetados nos extremos de uma amostra se redistribuem através da transmissão e reflexão através da mesma, dando origem a uma corrente elétrica. O resultado obtido por ele era coerente com o que se esperava: se $T \rightarrow 1$ (condutor perfeito) então $G \rightarrow +\infty$, ou seja, a resistência $\mathcal{R} = G^{-1}$ tende a zero.

Houve uma série de tentativas de demonstrar a fórmula proposta por Landauer, porém algumas alcançaram resultados distintos². Em 1981, Economou e Soukoulis¹⁰, utilizando teoria de resposta linear, encontraram para o caso de um canal unidimensional e sem degenerescência de spin:

$$G = \frac{e^2}{h} T. \quad (1.2)$$

No mesmo ano, Fisher e Lee¹¹ generalizaram este resultado para o caso de vários canais de propagação:

$$G = \frac{e^2}{h} Tr\{\mathbf{t}\mathbf{t}^\dagger\}. \quad (1.3)$$

sendo $\mathbf{t}$ um bloco fora da diagonal da matriz de espalhamento. Tal matriz relaciona as amplitudes de entrada a e de saída b da amostra ilustradas na Fig.(1.1), através de

*Sistemas mesoscópicos são aqueles cujas dimensões estão entre o microscópico e o macroscópico, porém grandes o suficiente para se considerar átomos ou moléculas coletivamente⁷ (no caso de condutores: entre 1nm e $100\mu\text{m}$)¹. Usualmente, toma-se como limite superior o caminho livre médio elástico do elétron.

diferentes canais:

$$b_i = \sum_j s_{ij} a_j, \quad (1.4)$$

em que s_{ij} são seus elementos. Os elementos $s_{i \neq j}$ estão relacionados com a transmissão e s_{ii} com a reflexão. O módulo ao quadrado destes elementos dá, respectivamente, as probabilidades de transmissão e de reflexão: $|s_{i \neq j}|^2 = T_{ij}$ e $|s_{ii}|^2 = R_i$. S deve ser uma matriz unitária, ou seja, $S^\dagger S = S S^\dagger = \mathbf{1}$ (matriz identidade). Em termos dos elementos de matriz: $\sum_{m=1}^{M+N} |s_{nm}|^2 = 1$, ou seja, a soma das probabilidades de passar do canal n para todos é 100%, o que garante que as amplitudes não aumentem indefinidamente após infinitas reflexões e transmissões.

Figura 1.1 – Amplitudes de M modos à direita da amostra e N à esquerda. a 's são amplitudes de ondas que vão em direção ao centro espalhador e b 's amplitudes que vão na direção contrária.

Era claro que as fórmulas das Eq.(1.2) e (1.3) contradiziam o trabalho de Landauer, além disso levavam a um resultado considerado suspeito: $G = \frac{e^2}{h}$ para $T = 1$, ou seja, mesmo um condutor perfeito apresentaria resistência não-nula. Engquist e Anderson¹² mostraram que a situação real para a qual valeria Eq.(1.1) seria aquela com 4 terminais: 2 terminais originais e 2 pontas de prova para medir o potencial químico na região dos contatos. Essa discussão também levantava questões sobre o grau de influência das pontas de prova, o que, segundo Engquist e Anderson, não poderia ser negligenciado. Em 1985, Büttiker *et al.*¹³ esclareceram a questão, observando que a Eq.(1.1) parte da diferença de potencial entre os extremos da amostra, enquanto as Eq.(1.2) e (1.3) partem da diferença de potencial químico entre os terminais. Desta forma, a resistência $\frac{e^2}{h}$ obtida da Eq.(1.2) $T = 1$ seria devido à presença inevitável dos contatos. De fato, invertendo a Eq.(1.2) e desmembrando em 2 termos:

$$G^{-1} = \underbrace{\frac{h}{e^2}}_{\text{resistência dos contatos}} + \underbrace{\frac{h}{e^2} \left(\frac{1-T}{T} \right)}_{\text{resistência da amostra}}. \quad (1.5)$$

Para o caso em que diferentes canais de propagação apresentam a mesma probabilidade

de transmissão T , a Eq.(1.3) se reduz a

$$G = \frac{e^2}{h} MT, \quad (1.6)$$

em que M é o número total de canais.

Os experimentos demonstrados em 1988 por van Wees *et al.*¹⁴ e simultaneamente por Wharam *et al.*¹⁵ confirmaram o aparecimento de canais de propagação discretos em um gás de elétrons bidimensional (2DEG - *Two-dimensional Electron Gas*) em semicondutores. Para criar uma região central mais estreita ocupada pelo gás de elétrons, foram montados contatos (chamados de *quantum point contacts*) acima do plano do gás com voltagem de *gate* negativa variável. O número de modos transversais está ligado ao tamanho do estreitamento criado pela voltagem de *gate*. Então, aumentando esta voltagem, estamos abrindo cada vez mais canais de espalhamento. O efeito é a curva em degraus de G versus V_{gate} (voltagem de *gate*), o que é mostrado na Fig.(1.2); em que cada degrau corresponde a uma faixa de voltagem para a qual o número de canais abertos é constante.

Figura 1.2 – Resultados obtidos por van Wees *et al.*¹⁴ demonstrando o aparecimento de degraus devido aos canais de propagação discretos em *quantum point contacts*.

Neste trabalho, estamos interessados no cálculo da corrente elétrica. A condutância sai desta última, apenas no regime de resposta linear, através da expressão $I = GV$. Não falaremos em resposta linear em geral, pois embora a intenção aqui seja nos restringirmos a um regime de voltagens baixas, trabalharemos em regiões em que é possível o aparecimento de ressonâncias nas probabilidades de transmissão. Estas ressonâncias darão uma assinatura não-linear à corrente elétrica.

1.2 Potencial Quântico Estudado

No estudo teórico do transporte eletrônico, muitas vezes buscam-se potenciais quânticos que ao mesmo tempo capturem a física de problemas reais e que sejam simples o suficiente para serem tratados exatamente. Este é o caso do potencial delta de Dirac acoplado a uma coordenada harmônica. Desde os trabalhos pioneiros, acerca de suas versões atrativa¹⁶ e repulsiva¹⁷, verificamos seu aparecimento frequente na literatura¹⁸⁻²¹. Costuma-se explorar a obtenção das amplitudes e o comportamento ressonante das probabilidades de transmissão. No entanto, trabalho algum discute o cálculo da corrente elétrica a partir destas probabilidades.[†] Destacamos que a corrente não pode ser obtida do formalismo de Landauer, pois este não considera a competição entre canais elásticos e inelásticos. O mesmo vale para qualquer situação em que o elétron espalhado troque energia com a amostra. Por exemplo, quando a amostra é composta por uma ou mais moléculas com modos de vibração conhecidos²², com aplicações na eletrônica molecular²³.

A amostra real de interesse deste trabalho é uma camada muito fina de um material B posicionada entre duas camadas mais espessas de um material A , em uma heteroestrutura semicondutora²⁴, como na Fig.(1.3). Esta camada muito fina deve conter impurezas, que consideraremos como sendo não-magnéticas; podendo inclusive corresponder ao material A adicionado de impurezas. No contexto do formalismo de Landauer e métodos semelhantes que serão discutidos neste trabalho, devemos modelar a amostra através de um potencial quântico. O potencial modelo, neste caso, é aquele da delta de Dirac acoplado a uma coordenada harmônica, em que a delta dá conta da descontinuidade entre A e B . Isto é uma idealização, pois a largura de B não será realmente infinitesimal, num experimento. Todavia, caso a largura seja menor que o comprimento de onda de de Broglie, na prática podemos usar tal idealização para os cálculos de espalhamento do elétron. O oscilador harmônico quântico fará o papel de simular o efeito de fônons acoplados à camada de impurezas.

Uma aproximação que utilizaremos ao longo do trabalho e que é de importante destaque é aquela em que ignoramos o efeito da voltagem no potencial quântico, num regime de voltagens baixas (eV abaixo da energia de Fermi). Isto será justificado na Seq.(2) através do exemplo de um potencial delta de Dirac desacoplado; quando veremos que a diferença entre os números de onda à direita e à esquerda do potencial é irrelevante

[†]Gelfand *et al.*¹⁷ obtêm uma expressão para a corrente de probabilidade que é uma média sobre os modos de oscilação. Desta corrente saem as probabilidades de transmissão e reflexão, cujo comportamento com a energia de incidência é analisado em detalhes. Não encontramos na literatura o passo seguinte, que seria usar as probabilidades de transmissão para o cálculo da corrente elétrica, a exemplo do formalismo de Landauer.

neste regime. A probabilidade de transmissão, neste caso, pode ser aproximada para aquela do potencial delta desacoplado sem o efeito de distorção devido à voltagem. A análise que pretendemos fazer para a corrente elétrica através da amostra da Fig.(1.3) não será prejudicada, já que podemos estudar casos em que os fenômenos de interesse são observados na corrente elétrica mesmo para voltagens tão baixas: o acesso a canais inelásticos e a estados quasi-estacionários. Estes últimos são verificados apenas no caso do potencial atrativo, quando é possível que um elétron incidente acesse virtualmente um estado ligado do potencial através da doação de um quantum de energia para o oscilador harmônico quântico. Como consequência, o espectro da probabilidade de transmissão apresenta um perfil de ressonância assimétrico, conhecido como ressonância de Fano²⁵, sobre o qual falaremos a seguir. O efeito na curva da corrente elétrica *versus* a voltagem aplicada é o aparecimento de um degrau, que pode ser compreendido em termos da integral na energia do perfil da ressonância de Fano.

Figura 1.3 – Ilustração mostrando a correspondência entre a amostra real de interesse deste trabalho e o seu potencial modelo. A amostra é a camada intermediária B (em verde) de uma heteroestrutura semicondutora, contendo impurezas. Esta camada será considerada muito fina com relação ao comprimento de onda de de Broglie. O potencial quântico correspondente a ser usado para o cálculo da corrente elétrica, através de suas probabilidades de transmissão, é um potencial delta de Dirac acoplado a um oscilador harmônico quântico de frequência ω . Tal acoplamento simula a interação com fônons na região da impureza, que consideramos como sendo não-magnética.

1.3 Ressonâncias de Fano

Nesta seção, explicaremos brevemente o que é uma ressonância de Fano, baseando-nos no artigo de revisão de Miroshnichenko, Flach e Kivshar²⁵. Este é o mesmo tipo de ressonância que aparecerá nas curvas da probabilidade de transmissão *versus* a energia do elétron incidente no potencial delta acoplado a um oscilador harmônico quântico. Isto será provado formalmente na Seq.(3.5), para acoplamento fraco. O perfil de Fano apresenta a seguinte forma:

$$\sigma = \frac{(\epsilon + q)^2}{\epsilon^2 + 1}, \quad (1.7)$$

em que q é o parâmetro de assimetria e ϵ a energia reduzida, definida por

$$\epsilon \equiv \frac{2(\varepsilon - \varepsilon_r)}{\Gamma}. \quad (1.8)$$

ε é a energia do espectro em questão. No caso de um processo de espalhamento, ε é a energia de incidência. ε_r é a energia de ressonância e Γ , a largura de ressonância. Podemos relacionar a largura de ressonância com os máximos e mínimos do perfil de Fano. σ é mínimo e igual a zero, quando $\epsilon = -q$. Então,

$$\sigma_{\min} = 0 \quad \text{em} \quad \varepsilon = \varepsilon_r - \frac{q\Gamma}{2}. \quad (1.9)$$

De forma similar, σ é máximo e igual a $1 + q^2$, quando $\epsilon = \frac{1}{q}$:

$$\sigma_{\max} = 1 + q^2 \quad \text{em} \quad \varepsilon = \varepsilon_r + \frac{\Gamma}{2q}. \quad (1.10)$$

Vemos na Fig.(1.4) que o parâmetro q nos dá uma medida da assimetria da ressonância, por isso seu nome. $q = 0$ e $|q| \rightarrow +\infty$ correspondem a perfis perfeitamente simétricos. Já $q = 1$ é o caso assimétrico para o qual o máximo e o mínimo estão distantes de $\Gamma/2$ da energia de ressonância ε_r , de acordo com as Eq.(1.9) e (1.10). O perfil assimétrico da ressonância aparece em problemas de espalhamento como um efeito de interferência entre a amplitude de um espectro contínuo com a de um espectro discreto. A fase entre estas muda bruscamente de π na região da ressonância, fazendo a interferência passar de destrutiva, no mínimo do perfil da Fano, para construtiva, em seu máximo. A amplitude do espectro discreto deve ter a forma de Breit-Wigner

$$\frac{1}{(\varepsilon - \varepsilon_r) - i\frac{\Gamma}{2}}, \quad (1.11)$$

Figura 1.4 – Perfis de Fano para $\varepsilon_r = 0$ e diferentes limites do parâmetro de assimetria, q . O fator $\frac{1}{1+q^2}$ é a normalização. $q = 0$ e $|q| \rightarrow +\infty$ correspondem a perfis simétricos, sendo o segundo correspondente a uma Lorentziana. $q = 1$ é o caso assimétrico para o qual o máximo e o mínimo equidistam de ε_r .²⁵

que dá conta da mudança de fase necessária para a descrição do perfil de Fano, quando se cruza ε_r .

O segundo artigo de Ugo Fano acerca deste perfil de ressonância²⁶, é considerado um dos 3 artigos do século 20 mais relevantes publicados nas *Physical Review*.²⁷ O contexto em que foram encontradas as ressonâncias de Fano, foi o da fotoionização de átomos. Sua intenção era explicar o aparecimento de picos abruptos no espectro de absorção de gases nobres.²⁸ Ugo Fano percebeu que o acoplamento entre níveis discretos e contínuos poderiam gerar perfis assimétricos de seções de choque. Em suma, um átomo pode ser fotoionizado retirando um de seus elétrons de uma camada mais interna, ou pode ser levado a um estado intermediário que pode se autoionizar ejetando um elétron e levando um outro elétron da mesma camada a nível de energia menor (efeito Auger). A primeira possibilidade leva o átomo do seu estado fundamental para um estado de um espectro contínuo de energias. A segunda possibilidade leva o átomo para um nível discreto correspondente à energia de autoionização.

Em diversos outros problemas físicos as ressonâncias de Fano surgem naturalmente. O exemplo de mecânica clássica que temos é aquele de dois pêndulos acoplados por uma mola, em que uma das massas sofre a ação de uma força periódica.²⁹ O módulo da amplitude do pêndulo forçado apresenta duas ressonâncias, uma para cada auto-frequência: uma simétrica e outra assimétrica. A ressonância simétrica tem o perfil de uma Lorentziana e a assimétrica, um perfil de Fano. O mínimo da ressonância de Fano acontece quando a frequência da força sobre o primeiro pêndulo coincide com a frequência de oscilação do segundo pêndulo. Isto porque acontece uma interferência destrutiva entre a

oscilação devido à força e à oscilação transmitida pela mola a partir do segundo pêndulo. Aqui, o espectro contínuo é o da amplitude da força e o discreto é o das auto-frequências dos pêndulos acoplados. Existem também sistemas na física de estado sólido em que as ressonâncias de Fano são observadas. Por exemplo, em experimentos de absorção de luz por pontos quânticos; já que comumente se considera que um ponto quântico apresenta o comportamento de um átomo artificial. O interessante aqui é que o parâmetro de assimetria do perfil de Fano do espectro de secções de choque pode ser sintonizado através da potência do feixe de laser incidente.³⁰ Encontramos outros exemplos em experimentos envolvendo contatos quânticos³¹, em que q é sintonizado através da separação entre os contatos, e superredes semicondutoras³², em que o campo elétrico aplicado é usado na sintonização.

1.4 Organização da Dissertação e Resultados

Esta dissertação foi organizada visando percorrer o desenvolvimento do formalismo de Landauer usual para o cálculo da corrente elétrica, ao longo do Cap.(2); uma primeira tentativa de adaptá-lo ao caso de espalhamento inelástico será apresentada na Seq.(4.1); e o método correto para este caso, segundo Emberly e Kirczenow²², será exposto na Seq.(4.2). Em suma, este método é um cálculo auto-consistente para as distribuições de elétrons nos canais elásticos e inelásticos. Através do mesmo, podemos considerar corretamente a competição entre tais canais, levando-se em conta todas as possíveis coincidências de energia após a doação ou aceitação de fônons pelo elétron espalhado.

O formalismo de Landauer pressupõe uma amostra a ser modelada por um potencial quântico, com probabilidades de transmissão conhecidas. Num capítulo intermediário, Cap.(3), expomos o potencial quântico de nosso interesse: o potencial delta de Dirac acoplado a uma coordenada harmônica, e a forma de se chegar às amplitudes e às probabilidades de transmissão. O potencial acoplado permite estudar o cálculo da corrente elétrica no caso inelástico, já que o elétron pode trocar energia com o oscilador harmônico quântico no processo de espalhamento. Parte do que é feito nesse capítulo é baseado num exemplo anterior, Seq.(2.4), em que tratamos do potencial delta de Dirac simples (desacoplado). Em tal exemplo, mostramos que para voltagens suficientemente pequenas, a inclusão de um potencial degrau devido à diferença de potencial entre os lados opostos da delta é indiferente para o resultado da corrente elétrica. Isto justifica desprezarmos o efeito da voltagem para o potencial delta acoplado.

O Cap.(5) é dedicado aos resultados obtidos através do método auto-consistente

de Emberly e Kirczenow²² e à comparação com os resultados obtidos pelo formalismo de Landauer adaptado ao espalhamento inelástico. Observamos o efeito de estados quasi-estacionários na corrente elétrica, quando a voltagem é suficiente para acessá-los. Isto pode ser descrito analiticamente através da integral do perfil da ressonância de Fano. Uma discrepância grande com o formalismo de Landauer foi demonstrada na situação em que o oscilador harmônico está inicialmente no primeiro estado excitado. Nesta situação, um canal inelástico, correspondente à absorção de um quantum de energia pelo elétron, é acessível para qualquer voltagem e o método auto-consistente se torna necessário para obtermos o resultado correto.

CAPÍTULO 2

Formalismo de Landauer

A corrente elétrica pode ser entendida como uma resposta ao campo elétrico aplicado, no entanto segundo Imry e Landauer³³: “[a corrente elétrica] pode ser vista como uma consequência da injeção de portadores nos contatos e sua probabilidade de atingir o extremo oposto”. Foi esta visão alternativa que deu origem ao formalismo de Landauer, o qual nos dá o método para o cálculo da corrente elétrica através de uma amostra a partir de suas probabilidades de transmissão. O caminho para a obtenção de tais probabilidades, ou equivalentemente dos elementos da matriz de espalhamento, não é descrito pelo formalismo. Aqui, delimitaremos o sistema físico tratado por este formalismo e faremos seu desenvolvimento de duas formas distintas: em primeira e segunda quantização. Então, trataremos do exemplo de um potencial delta de Dirac. Este exemplo corresponde a uma versão simplificada do problema a ser tratado no presente trabalho: o potencial delta de Dirac acoplado a uma coordenada harmônica, em que existe a possibilidade de o elétron incidente perder ou ganhar energia para o oscilador harmônico quântico. Para a delta de Dirac simples, o espalhamento será perfeitamente elástico. Veremos no Cap.(4), que o formalismo de Landauer não é capaz de descrever corretamente casos em que há a possibilidade de o elétron trocar energia com a amostra. Será necessária uma modificação da teoria, segundo Emberly e Kirczenow²², que leva em conta o princípio de exclusão de Pauli na competição entre canais elásticos e inelásticos.

2.1 Sistema Considerado no Formalismo

O formalismo trata do problema de uma amostra ligada a terminais, através de contatos. Neste trabalho, consideraremos sempre 2 terminais, como na Fig.(2.1), embora exista a possibilidade de considerarmos um número maior através da teoria desenvolvida por Markus Büttiker³⁴. A geometria do sistema ou um potencial elétrico confinante (em y e z) são responsáveis por limitar o transporte de elétrons entre um terminal e outro a apenas uma dimensão (direção x), embora a amostra seja tridimensional. O objetivo é calcular a corrente elétrica neste sistema. Podemos fazer isso, modelando a amostra como um potencial quântico em uma dimensão, de onde extraímos as probabilidades de transmissão e reflexão. A fórmula de Landauer dá a receita para calcularmos a corrente elétrica a partir destas probabilidades, porém não são fornecidos os passos que levam às mesmas. Veremos no exemplo da Seq.(2.4), que um dos métodos para se calcular tais probabilidades é o da função de Green³⁵.

Figura 2.1 – Sistema considerado no formalismo de Landauer: uma amostra a ser modelada por um potencial quântico posicionada entre dois terminais, L (do inglês *left*) e R (do inglês *right*), cuja diferença de potencial é V . O transporte é unidimensional, na direção x , havendo confinamento nas demais direções, y e z . As regiões imediatamente ao lado da amostra, as quais apresentam uma abertura suave, são os contatos da amostra com os terminais.

Devemos fazer suposições adicionais com relação ao sistema físico, para o desenvolvimento do formalismo de Landauer. Primeiro, o que estamos chamando de terminal será tratado como um reservatório de elétrons seguindo a estatística de Fermi-Dirac, com um potencial químico bem definido, longe da região da amostra. A diferença de energia potencial eV será igual à diferença destes potenciais químicos, $\mu_L - \mu_R$. À medida que nos aproximamos da amostra, na região dos contatos, o potencial elétrico varia de uma forma desconhecida e a distribuição de elétrons em um canal de espalhamento não é mais uma distribuição de equilíbrio.

Adicionalmente, os terminais devem ser incoerentes entre si.³⁶ Ou seja, as ondas parciais do espalhamento de um elétron vindo de um determinado terminal devem interferir mutualmente, mas não devem interferir com ondas parciais do espalhamento de elétrons vindos do terminal oposto. Assim, podemos resolver o problema de espalhamento, para o cálculo das probabilidades de transmissão, para uma onda incidente vindo a partir do lado esquerdo, por exemplo. Pela propriedade da reversibilidade temporal, isto é completamente equivalente a resolver o problema de uma onda vindo a partir do lado direito, resultando em uma probabilidade de transmissão idêntica. Estas duas possibilidades resultarão em correntes elétricas médias (média temporal e térmica) de sinais opostos que serão simplesmente somadas para obtermos a corrente total média. Isto porque um termo que mistura ondas provenientes de terminais distintos deve ter média nula, já que a diferença de fases é aleatória.³⁷

Outra suposição é a de que a probabilidade de reflexão da amostra para qualquer um dos contatos é nula. Isto justifica a abertura suave dos contatos como desenhamos na Fig.(2.1) e garante que não haja ondas parciais adicionais na interferência, devido a possíveis reflexões na região dos contatos. A última suposição que discutiremos é um ponto chave do presente trabalho: no referencial do elétron, o espalhamento deve ser elástico. Isto significa que o elétron não pode trocar energia com a amostra, mesmo que a energia total se conserve. O formalismo de Landauer não é capaz de levar em conta corretamente casos em que o elétron incidente perde (ou ganha) energia para a amostra e cai em um canal de espalhamento que pode coincidir em energia com algum outro canal de um processo distinto. Isto será levado em conta corretamente através de um outro método, discutido na Seq.(4.2), seguindo o trabalho de Emberly e Kirczenow²². O presente trabalho trata especialmente de um caso em que esta suposição é desrespeitada: um potencial delta de Dirac é acoplado a um oscilador harmônico quântico, capaz de trocar energia com os elétrons incidentes. No formalismo usual, a perda de energia na região dos contatos é irrelevante, pois importa somente o canal ocupado imediatamente antes do espalhamento.

2.2 Dedução em Primeira Quantização

Aqui, faremos a dedução em primeira quantização, para ilustrar que a corrente elétrica total do lado esquerdo, por exemplo, é calculada a partir das correntes relacionadas com a onda incidente pelo lado esquerdo, refletida neste mesmo lado e transmitida da direita para a esquerda, separadamente. Como estamos supondo terminais incoerentes entre si e esta dedução subentende correntes médias (média térmica e temporal), não haverá termo

que misture ondas de terminais diferentes. No caso da dedução em segunda quantização, o aspecto que é ressaltado é o da ocupação de canais de espalhamento distintos, através da criação e aniquilação de elétrons nos mesmos. Isto é possível, pois o valor esperado do operador de corrente é extraído somente no fim da dedução.

Consideraremos uma amostra descrita por um potencial quântico em uma dimensão (ao longo de x) e um potencial confinante nas dimensões restantes (y e z). Assim, a solução da equação de Schrödinger deve ser separável em uma parte longitudinal e outra transversa. Como em y e z temos condições de contorno bem definidas, a solução transversal apresentará modos descritos por uma base completa, à semelhança de uma corda presa nos dois extremos descrita por uma base de senos e cossenos. Esta solução desaparecerá do problema quando fizermos uma integral sobre a seção transversal da amostra para o cálculo da corrente, através da relação de ortonormalidade dos elementos da base. Desta forma, apenas o espalhamento longitudinal importará no formalismo.

A amostra encontra-se entre dois reservatórios de elétrons, com potenciais químicos μ_L e μ_R , como esquematizado na Fig.(2.2). Dividiremos o potencial em duas regiões: L (do inglês *left*), à esquerda do potencial, e R (do inglês *right*), à direita. Assim, uma onda plana incidente à esquerda carregará um número de onda longitudinal $k_n^L(E)$ e uma incidente à direita $k_n^R(E)$, em que E é a energia total. n é o modo transversal correspondente a uma função χ_n da base completa de soluções transversais, com energia de ocupação ϵ_n . Seja qual for o lado de incidência, a energia total E será uma soma da energia cinética longitudinal, a energia do canal transversal ocupado e um deslocamento de $\frac{eV}{2}$ (positivo à esquerda e negativo à direita) devido à aplicação da voltagem:

$$E = \frac{\hbar^2(k_n^L)^2}{2m} + \epsilon_n + \frac{eV}{2} = \frac{\hbar^2(k_n^R)^2}{2m} + \epsilon_n - \frac{eV}{2}. \quad (2.1)$$

A função de onda à esquerda do potencial, devido a elétrons saindo do reservatório esquerdo com energia total E , será composta pela onda incidente na direção longitudinal e a onda parcial refletida nesta mesma direção:

$$\psi_L(x \leq -d/2, y, z; E) = \sum_{n=1}^{M(E)} \chi_n(z, y) \left\{ \frac{1}{\sqrt{k_n^L(E)\hbar/m}} e^{ik_n^L(E)x} + \frac{r_{LL,n}(E)}{\sqrt{k_n^L(E)\hbar/m}} e^{-ik_n^L(E)x} \right\}, \quad (2.2)$$

em que $\chi_n(z, y)$ é parte transversal da função de onda e ainda somamos sobre todos os modos transversais acessíveis para a energia E , de 1 a $M(E)$. Um modo transversal se torna acessível quando a energia cinética total ultrapassa a energia deste modo, ou, em outras palavras, quando o número de onda associado a esse modo deixa de ser imaginário puro para se tornar real. Isto significa que um novo canal de transmissão é aberto quando

Figura 2.2 – Potencial genérico $V(x)$ que descreve a amostra, no contexto do formalismo de Landauer, e as distribuições de elétrons à esquerda ($x \leq -d/2$) e à direita ($x \geq d/2$). Omitimos aqui o potencial confinante nas direções y e z . O comprimento longitudinal da amostra é d . À direita a distribuição encontra-se elevada de $eV/2$ e à esquerda abaixada do mesmo valor. A diferença de potencial total é de eV . O potencial químico à esquerda passa de ε_F para $\varepsilon_F + eV/2$, com a aplicação da voltagem. Da mesma forma, à direita passa de ε_F para $\varepsilon_F - eV/2$. Somente elétrons incidindo com energia cinética total acima de $eV/2$ são propagantes, quando k_L (número de onda associado à direção x , do lado esquerdo) é real.

o modo transversal associado a este deixa de corresponder a ondas evanescentes. $M(E)$ é o último modo acessível na energia E . $r_{\alpha\alpha,n}$ é o que chamaremos aqui de coeficiente de reflexão do lado α , através do n -ésimo canal transversal. Do lado direito teremos apenas a onda transmitida:

$$\psi_L(x \geq d/2, y, z; E) = \sum_{n=1}^{M(E)} \chi_n(z, y) \frac{t_{LR,n}(E)}{\sqrt{k_n^L(E) \hbar/m}} e^{ik_n^R(E)x}, \quad (2.3)$$

em que $t_{\alpha\beta,n}$ é o coeficiente de transmissão do lado α para o β , através do n -ésimo canal transversal. Os fatores carregando números de onda, da forma $\frac{1}{\sqrt{k\hbar/m}}$, correspondem a 1 sobre a raiz quadrada da velocidade, já que segundo de Broglie o momentum é $\hbar k$. A inclusão de tais fatores é justificada por facilitar a conexão entre as correntes de probabilidade e as probabilidades de transmissão e reflexão, mais à frente. Isto deve ser encarado apenas como uma conveniência matemática. O usual seria utilizar elementos da matriz de espalhamento, o que tornaria a álgebra um pouco mais simples, já que a matriz de espalhamento possui propriedades bem definidas. Por exemplo, a matriz de espalhamento apresenta simetria em blocos: $\mathbf{t}' = \mathbf{t}$ e $\mathbf{r}' = \mathbf{r}$, para a matriz escrita na forma

$$S = \begin{pmatrix} \mathbf{r} & \mathbf{t}' \\ \mathbf{t} & \mathbf{r}' \end{pmatrix}. \quad (2.4)$$

Isto está diretamente ligado à reversibilidade temporal, pois os blocos $\mathbf{t}'$ e $\mathbf{r}'$ estão relacionados a ondas parciais incidindo pelo lado oposto em relação a $\mathbf{t}$ e $\mathbf{r}$. Adicionalmente, a matriz de espalhamento apresenta a propriedade de unitariedade ($S^\dagger S = SS^\dagger = \mathbb{1}$), que está associada à conservação de probabilidade, já que tal propriedade impõe

$$\mathbf{t}^\dagger \mathbf{t} + \mathbf{r}^\dagger \mathbf{r} = \mathbf{t} \mathbf{t}^\dagger + \mathbf{r} \mathbf{r}^\dagger = \mathbb{1}; \quad (2.5)$$

além de impor condições que envolvem produtos que misturam os blocos de reflexão e transmissão: $\mathbf{r}^\dagger \mathbf{t}' + \mathbf{t}^\dagger \mathbf{r}' = \mathbf{r} \mathbf{t}'^\dagger + \mathbf{t} \mathbf{r}'^\dagger = \mathbf{0}$ e $\mathbf{t}'^\dagger \mathbf{r} + \mathbf{r}'^\dagger \mathbf{t} = \mathbf{t}' \mathbf{r}^\dagger + \mathbf{r}' \mathbf{t}^\dagger = \mathbf{0}$. Em termos dos elementos da matriz de espalhamento, escreveríamos

$$\psi_L(x \leq -d/2, y, z; E) = \sum_{n=1}^{M(E)} \chi_n(z, y) \left[e^{ik_n^L(E)x} + s_{LL,n}(E) e^{-ik_n^L(E)x} \right] \quad (2.6)$$

e

$$\psi_L(x \geq d/2, y, z; E) = \sum_{n=1}^{M(E)} \chi_n(z, y) \sqrt{\frac{k_n^L(E)}{k_n^R(E)}} s_{LR,n}(E) e^{ik_n^R(E)x}. \quad (2.7)$$

No entanto, preferimos expressar as amplitudes em termos dos coeficientes de transmissão e reflexão. Veremos que estes se relacionarão com as probabilidades de transmissão e reflexão através de fatores que incluem os números de onda explicitamente, de acordo com as Eq.(2.30) e (2.31). Estas probabilidades serão obtidas fazendo-se a razão entre a corrente de probabilidade de estados de transmissão (reflexão) e a corrente do estado incidente. Voltando à notação deste trabalho, a onda parcial transmitida através do potencial, devido a elétrons saindo do reservatório direito será

$$\psi_R(x \leq -d/2, y, z; E) = \sum_{n=1}^{M(E)} \chi_n(z, y) \frac{t_{RL,n}(E)}{\sqrt{k_n^R(E) \hbar/m}} e^{-ik_{n,j}^L(E)x}. \quad (2.8)$$

A onda incidente e a onda parcial refletida, ambas devido a elétrons saindo do reservatório direito:

$$\psi_R(x \geq d/2, y, z; E) = \sum_{n=1}^{M(E)} \chi_n(z, y) \left\{ \frac{1}{\sqrt{k_n^R(E) \hbar/m}} e^{-ik_n^R(E)x} + \frac{r_{RR,n}(E)}{\sqrt{k_n^R(E) \hbar/m}} e^{ik_n^R(E)x} \right\}. \quad (2.9)$$

Ponto importante: deveríamos incluir uma fase aleatória nas funções de onda devido a um dos terminais, pois uma suposição básica do formalismo de Landauer é a de que os reservatórios sejam incoerentes entre si.³⁷ Procederemos de forma diferente: consideraremos que a corrente elétrica total a ser calculada já constitui uma média temporal e, portanto, correntes elétricas devido a terminais distintos serão simplesmente somadas, sem termos de interferência.

Calcularemos a corrente elétrica em $x \leq -d/2$, a partir das funções de onda em Eq.(2.2) e Eq.(2.8). A densidade de corrente de probabilidade será calculada através de

$$\mathcal{J}(\mathbf{r}; E) = \frac{\hbar}{2im} [\psi^*(\mathbf{r}; E) \partial \psi(\mathbf{r}; E) - \partial \psi^*(\mathbf{r}; E) \psi(\mathbf{r}; E)]. \quad (2.10)$$

Para reduzir a notação, faremos a seguinte definição:

$$\mathcal{J}_i \equiv \frac{\hbar}{2im} [\psi_i^* \partial \psi_i - \partial \psi_i^* \psi_i] \quad , \quad i = 1, 2, 3; \quad (2.11)$$

em que $\partial \equiv \frac{\partial}{\partial x}$ e

$$\psi_1 \equiv \sum_{n=1}^{M(E)} \chi_n(z, y) \frac{1}{\sqrt{k_n^L(E) \hbar/m}} e^{ik_n^L(E)x}, \quad (2.12)$$

$$\psi_2 \equiv \sum_{n=1}^{M(E)} \chi_n(z, y) \frac{r_{LL,n}}{\sqrt{k_n^L(E) \hbar/m}} e^{-ik_n^L(E)x} \quad (2.13)$$

e

$$\psi_3 \equiv \sum_{n=1}^{M(E)} \chi_n(z, y) \frac{t_{RL,n}}{\sqrt{k_n^R(E) \hbar/m}} e^{-ik_n^L(E)x}. \quad (2.14)$$

Desta forma, $\psi_L(x \leq -d/2, y, z; E) = \psi_1 + \psi_2$, da Eq.(2.2); e $\psi_R(x \leq -d/2, y, z; E) = \psi_3$, da Eq.(2.8). A densidade de corrente de probabilidade para ondas originárias do reservatório esquerdo será

$$\mathcal{J}_{(\text{res.}L)} = \frac{\hbar}{2im} [\psi^* \partial \psi - \partial \psi^* \psi] \quad (2.15)$$

$$= \frac{\hbar}{2im} [(\psi_1^* + \psi_2^*) (\partial \psi_1 + \partial \psi_2) - (\partial \psi_1^* + \partial \psi_2^*) (\psi_1 + \psi_2)] \quad (2.16)$$

$$= \mathcal{J}_1 + \mathcal{J}_2 + \frac{\hbar}{2im} [\psi_1^* \partial \psi_2 + \psi_2^* \partial \psi_1 - \partial \psi_1^* \psi_2 - \partial \psi_2^* \psi_1]. \quad (2.17)$$

Das equações Eq.(2.12) e (2.13), podemos tirar as seguintes relações para as n -ésimas componentes de ψ_1 e ψ_2 :

$$\partial(\psi_1)_n = ik_n^L(\psi_1)_n, \quad \partial(\psi_1)_n^* = -ik_n^L(\psi_1)_n^*, \quad (2.18)$$

$$\partial(\psi_2)_n = -ik_n^L(\psi_2)_n \quad \text{e} \quad \partial(\psi_2)_n^* = ik_n^L(\psi_2)_n^*. \quad (2.19)$$

As correntes de probabilidade $\mathcal{I}_{(\text{res.}L)}$ e $\mathcal{I}_{(\text{res.}R)}$, do lado esquerdo, serão obtidas integrando $\mathcal{J}_{(\text{res.}L)}$ e $\mathcal{J}_{(\text{res.}R)}$ nas coordenadas ortogonais (y e z) à direção de propagação. Considerando que os canais dos modos transversos componham uma base completa,

$$\int dy dz \chi_{n'}^*(z, y) \chi_n(z, y) = \delta_{n,n'}. \quad (2.20)$$

Desta forma, a Eq.(2.15), após a integração sobre y e z , se torna

$$\mathcal{I}_{(\text{res.}L)} = \mathcal{I}_1 + \mathcal{I}_2. \quad (2.21)$$

As ondas ψ_1 (onda incidente) e ψ_2 (onda refletida) guardam relação de fase entre si, pois são provenientes do mesmo terminal. Não obstante, o resultado da Eq.(2.21) mostra que não há interferência entre ψ_1 e ψ_2 . Isto é uma consequência do teorema de Kramers, o qual nos diz que os estados temporalmente reversos (fermiônicos) de um Hamiltoniano invariante por este tipo de transformação são ortogonais.³⁸ A corrente associada a ondas oriundas do reservatório direito, $\mathcal{I}_{(\text{res.}R)}$, será simplesmente

$$\mathcal{I}_{(\text{res.}R)} = \mathcal{J}_3. \quad (2.22)$$

A seguir, precisamos de expressões para $\mathcal{I}_1$, $\mathcal{I}_2$ e $\mathcal{I}_3$. Vejamos como fica $\mathcal{I}_1$:

$$\begin{aligned} \mathcal{I}_1(E) &= \int dy dz \mathcal{J}_1 \\ &= \frac{\hbar}{2im} \int dy dz \\ &\times \left\{ \sum_{n'=1}^{M(E)} \chi_{n'}^*(z, y) \frac{e^{-ik_{n'}^L(E)x}}{\sqrt{k_{n'}^L(E)\hbar/m}} \sum_{n=1}^{M(E)} \chi_n(z, y) ik_n^L(E) \frac{e^{ik_n^L(E)x}}{\sqrt{k_n^L(E)\hbar/m}} \right. \\ &\quad \left. - \sum_{n'=1}^{M(E)} \chi_{n'}^*(z, y) [-ik_{n'}^L(E)] \frac{e^{-ik_{n'}^L(E)x}}{\sqrt{k_{n'}^L(E)\hbar/m}} \sum_{n=1}^{M(E)} \chi_n(z, y) \frac{e^{ik_n^L(E)x}}{\sqrt{k_n^L(E)\hbar/m}} \right\}. \end{aligned} \quad (2.23)$$

$$(2.24)$$

Utilizando a relação de ortonormalidade da Eq.(2.20), podemos simplificar a Eq.(2.23) para

$$\mathcal{I}_1(E) = M(E). \quad (2.25)$$

Procedendo de forma similar,

$$\mathcal{I}_2(E) = - \sum_{n=1}^{M(E)} |r_{LL,n}(E)|^2 \quad (2.26)$$

e

$$\mathcal{I}_3(E) = - \sum_{n=1}^{M(E)} \frac{k_n^L(E)}{k_n^R(E)} |t_{RL,n}(E)|^2, \quad (2.27)$$

em que o número de onda longitudinal do numerador veio das derivadas espaciais e o do denominador veio do fator $\frac{1}{\sqrt{k_n^R(E)\hbar/m}}$ que incluímos inicialmente na onda parcial ψ_3 , de acordo com a Eq.(2.14). No caso de $\mathcal{I}_2$, os números de onda são iguais e se cancelam na

divisão. Os sinais indicam que $\mathcal{I}_1$ é uma corrente se propagando no sentido positivo do eixo x e que $\mathcal{I}_2$ e $\mathcal{I}_3$ são correntes se propagando no sentido contrário. A densidade de elétrons em x , do lado esquerdo, é dada multiplicando-se cada corrente de probabilidade pela distribuição associada ao seu reservatório de origem sobre o tamanho do sistema em x , L_x , e somando-se sobre todos os canais transversais e sobre números de onda longitudinais reais:

$$\begin{aligned} \rho_L = & \frac{1}{L_x} \sum_{n=1}^{M(E)} \sum_{k_n^L \in \mathbb{R}} [\mathcal{I}_{1,n}(E) + \mathcal{I}_{2,n}(E)] F(E - \mu_L) \\ & + \frac{1}{L_x} \sum_{n=1}^{M(E)} \sum_{k_n^R \in \mathbb{R}} \mathcal{I}_{3,n}(E) F(E - \mu_R). \end{aligned} \quad (2.28)$$

$\mathcal{I}_{j,n}$ representa a componente n da corrente de probabilidade $\mathcal{I}_j$. Estamos representando a função de Fermi da seguinte forma:

$$F(\varepsilon) = \frac{1}{e^{-\varepsilon/(k_B T)} + 1}, \quad (2.29)$$

em que ε será substituído por $E - \mu_L$ para a distribuição do reservatório esquerdo e por $E - \mu_R$ para o reservatório do lado direito. A probabilidade de reflexão do lado esquerdo no modo transversal n é obtida dividindo sua corrente correspondente, $\mathcal{I}_{2,n}$, pela corrente da onda incidente, $\mathcal{I}_{1,n}$. Isto dá

$$R_{LL,n} = |r_{LL,n}|^2. \quad (2.30)$$

Similarmente, para a probabilidade de transmissão:

$$T_{RL,n} = \frac{k_n^L(E)}{k_n^R(E)} |t_{RL,n}|^2. \quad (2.31)$$

Em termos de elementos da matriz de espalhamento, $T_{RL,n} = |s_{RL,n}|^2$. Desta forma, na Eq.(2.28), estamos somando probabilidades de transmissão e reflexão multiplicadas pelas distribuições dos reservatórios de origem:

$$\begin{aligned} \rho_L = & \frac{1}{L_x} \sum_{n=1}^{M(E)} \sum_{k_n^L \in \mathbb{R}} [1 - R_{LL,n}] F(E - \mu_L) \\ & - \frac{1}{L_x} \sum_{n=1}^{M(E)} \sum_{k_n^R \in \mathbb{R}} T_{RL,n} F(E - \mu_R). \end{aligned} \quad (2.32)$$

Utilizaremos a conservação de probabilidade para o espalhamento de elétrons vindos do lado esquerdo:

$$T_{LR,n} + R_{LL,n} = 1, \quad (2.33)$$

ou equivalentemente a unitariedade da matriz de espalhamento:

$$|s_{LR,n}(E)|^2 + |s_{LL,n}(E)|^2 = 1. \quad (2.34)$$

Adicionalmente, podemos utilizar a propriedade de reversibilidade temporal para escrever

$$T_{LR,n} = T_{RL,n} \equiv T_n(E), \quad (2.35)$$

ou de forma equivalente, a simetria da matriz de espalhamento; e simplificar ainda mais a expressão da densidade de corrente:

$$\rho_L = \frac{1}{L_x} \sum_{n=1}^{M(E)} \sum_{k_n^L \in \mathbb{R}} T_n(E) F(E - \mu_L) - \frac{1}{L_x} \sum_{n=1}^{M(E)} \sum_{k_n^R \in \mathbb{R}} T_n(E) F(E - \mu_R), \quad (2.36)$$

em que E depende de k_n^L e k_n^R segundo a Eq.(2.1). Podemos passar da soma para a integral no número de onda longitudinal, contando o número de estados contidos na distância longitudinal L_x , para condições periódicas de contorno: $\sum_k \rightarrow 2 \frac{L_x}{2\pi} \int dk$. O fator 2 vem de incluirmos nesta contagem as duas possíveis polarizações ($\uparrow$ e $\downarrow$) associadas à projeção do spin do elétron e de desconsiderarmos a dependência da matriz de espalhamento com esta polarização. Assim, a corrente elétrica do lado esquerdo $I_L = \rho_L e v$ será

$$\begin{aligned} I_L = & \frac{2e}{2\pi} \sum_{n=1}^{M(E)} \int_{k_n^L \in \mathbb{R}} dk_n^L(E) \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E}{\partial k_n^L} T_n(E) F(E - \mu_L) \\ & - \frac{2e}{2\pi} \sum_{n=1}^{M(E)} \int_{k_n^R \in \mathbb{R}} dk_n^R(E) \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E}{\partial k_n^R} T_n(E) F(E - \mu_R), \end{aligned} \quad (2.37)$$

em que escrevemos a velocidade v como $\frac{\partial E}{\partial(\hbar k)}$. Simplificando,

$$I_L = \frac{2e}{2\pi\hbar} \sum_{n=1}^{+\infty} \int_{\frac{eV}{2}}^{+\infty} dE [F(E - \mu_L) - F(E - \mu_R)] T_n(E). \quad (2.38)$$

O limite inferior de integração em energia corresponde, na Fig.(2.2), à energia a partir da qual temos modos propagantes, isto é, números de onda reais. Vamos considerar que $\epsilon_1 = 0$ (equivalente a redefinir o zero de energia) e que o segundo modo seja inacessível ($\epsilon_2 \rightarrow +\infty$). Então,

$$I_L = \frac{2e}{2\pi\hbar} \int_{\frac{eV}{2}}^{+\infty} dE [F(E - \mu_L) - F(E - \mu_R)] T_1(E). \quad (2.39)$$

Se optarmos pela integração sobre $\varepsilon_x = E - \epsilon_n$, teremos

$$I_L = \frac{2e}{2\pi\hbar} \int_{\frac{eV}{2}}^{+\infty} d\varepsilon_x \sum_{n=1}^{M(\varepsilon_x)} [F(\varepsilon_x + \epsilon_n - \mu_L) - F(\varepsilon_x + \epsilon_n - \mu_R)] T(\varepsilon_x, V). \quad (2.40)$$

E então, para um só modo, $M(\varepsilon_x) = 1$:

$$I_L = \frac{2e}{2\pi\hbar} \int_{\frac{eV}{2}}^{+\infty} d\varepsilon_x [F(\varepsilon_x - \mu_L) - F(\varepsilon_x - \mu_R)] T(\varepsilon_x, V) \quad (2.41)$$

a que nos referiremos, daqui em diante, como fórmula de Landauer. Note que $T(\varepsilon_x, V)$ é a probabilidade de transmissão através do potencial somente na região da amostra, mas que pode depender da voltagem devido à distorção do potencial ilustrada na Fig.(2.2). Veremos no exemplo da Seq.(2.4), que num regime de voltagens muito baixas (abaixo da energia de Fermi), é possível ignorar o efeito da distorção do potencial quântico sem comprometer a corrente elétrica. Neste caso, a dependência com a voltagem só entra no problema através do limite de integração inferior: $\frac{eV}{2}$, e dos potenciais químicos nas distribuições de Fermi: $\mu_L = \varepsilon + \frac{eV}{2}$ e $\mu_R = \varepsilon - \frac{eV}{2}$.

2.3 Dedução em Segunda Quantização

Na abordagem anterior, Seq.(2.2), trabalhamos sempre com os valores esperados e não com os operadores em si. Já a dedução em segunda quantização tratará o sistema como um problema quântico de muitos corpos não-interagentes, em que as distribuições de elétrons nos reservatórios surgirão dos valores esperados dos operadores número (pares da forma $a^\dagger a$ agindo sobre o mesmo estado de espalhamento). Nesta seção, baseamo-nos em grande parte no artigo de Blanter e Büttiker³⁹, a qual revisa o formalismo em detalhes.

Desejamos chegar ao operador de campo, em segunda quantização, de um dos lados do centro espalhador. Esta é uma entidade análoga à função de onda em primeira quantização, mas que ao invés de amplitudes de espalhamento, é composta por operadores que criam e aniquilam elétrons em estados de espalhamento. A vantagem de deduzirmos o formalismo de Landauer desta forma será a de que podemos apreciar a ocupação e desocupação de canais de espalhamento a partir destes operadores. Além disso, a dedução em segunda quantização é mais sistemática, pois não precisamos construir a corrente elétrica a partir das distribuições de Fermi, como foi feito em primeira quantização. As distribuições dos reservatórios surgem naturalmente ao tirarmos o valor esperado de pares de operadores que criam e aniquilam seguidamente (operadores número). Para a obtenção do

operador de campo, primeiramente escrevemos a função de onda como uma superposição dos estados de espalhamento:

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sum_{n, \alpha, \sigma} \int dk_n^\alpha \psi_n^\alpha(\mathbf{r}, k_n^\alpha) A_{n, \sigma}^\alpha(k_n^\alpha) e^{-iEt/\hbar}. \quad (2.42)$$

O procedimento é considerar as amplitudes $A_{n, \sigma}^\alpha(k_n^\alpha)$ na Eq. (2.42) como operadores $d_{n, \sigma}^\alpha(k_n^\alpha)$ agindo no espaço de Fock*. $d_{n, \sigma}^\alpha(k_n^\alpha)$ é um operador Fermiônico que aniquila um elétron com número de onda k_n^α , no n -ésimo canal de propagação, incidindo pelo lado $\alpha = L, R$ (esquerda ou direita) e com polarização de spin $\sigma = \uparrow, \downarrow$. Vamos nos restringir ao lado esquerdo ($x \leq -d/2$) do potencial. O operador de campo agindo deste lado será

$$\begin{aligned} \Psi(x \leq -d/2, y, z; t) = & \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sum_n \sum_{\sigma=\uparrow, \downarrow} \int_0^{+\infty} dk_n^L e^{-iEt/\hbar} \chi_n(y, z) \\ & \times \left[e^{ik_n^L x} d_{n, \sigma}^L(k_n^L) + e^{-ik_n^L x} r_{LL}(k_n^L) d_{n, \sigma}^L(k_n^L) \right] \\ & + \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sum_n \int_0^{+\infty} dk_n^R e^{-ik_n^R x} t_{RL}(k_n^R) d_{n, \sigma}^R(k_n^R), \end{aligned} \quad (2.43)$$

em que poderíamos incluir uma fase aleatória, por exemplo multiplicando a primeira integral da Eq.(2.43); já que uma suposição básica do formalismo de Landauer é a de que os terminais sejam incoerentes entre si. No entanto, os valores esperados de observáveis sempre envolverão pares $\Psi\Psi^\dagger$ e $\Psi^\dagger\Psi$, de forma que a fase aleatória é cancelada naturalmente, sendo desnecessária sua inclusão, na prática; como destacado por Markus Büttiker³⁷. Note, no entanto, que a fase é importante para descartarmos termos que misturam operadores de campos de elétrons oriundos de reservatórios distintos, já que a mesma não se cancela. Reinvocaremos esta fase aleatória no momento em que calcularmos o valor esperado do operador corrente elétrica. Mudaremos a variável de integração, do número de onda longitudinal (direção x), para a energia de incidência longitudinal ε_x :

$$\varepsilon_x \equiv E - \epsilon_n = \frac{\hbar^2 (k_n^L)^2}{2m} + \frac{eV}{2} = \frac{\hbar^2 (k_n^R)^2}{2m} - \frac{eV}{2}, \quad (2.44)$$

segundo a Eq.(2.1), em que E é a energia total e ϵ_n a energia cinética associada ao n -ésimo modo transversal. O diferencial de $k_{n, J}^\alpha(\varepsilon_x)$, então, se transforma segundo

$$dk_n^\alpha(\varepsilon_x) = d\varepsilon_x \frac{m}{\hbar^2 k_n^\alpha(\varepsilon_x)}, \quad (2.45)$$

com ε_x variando de $\frac{eV}{2}$ a $+\infty$. Isto pode ser compreendido através da Fig.(2.2), em que vemos um deslocamento vertical dos potenciais químicos de $\frac{eV}{2}$ a partir da origem de ener-

*O espaço de Fock é um espaço em que é possível se descrever populações de partículas. É formado pela soma direta de espaços de Hilbert de uma só partícula.

gia, devido à voltagem aplicada. A energia mínima com que elétrons saem do reservatório esquerdo é $\frac{eV}{2}$, como consequência deste deslocamento. Além disso, elétrons que saem do reservatório direito com energia menor que $\frac{eV}{2}$ correspondem a ondas evanescentes no lado esquerdo. Para mudar as variáveis dos operadores de Fermi, precisamos partir da relação de anti-comutação:

$$\begin{aligned} d_{n',\sigma'}^{\alpha'\dagger}[k_{n'}^{\alpha'}(\varepsilon'_x)]d_{n,\sigma}^\alpha[k_n^\alpha(\varepsilon_x)] + d_{n,\sigma}^\alpha[k_n^\alpha(\varepsilon_x)]d_{n',\sigma'}^{\alpha'\dagger}[k_{n'}^{\alpha'}(\varepsilon'_x)] \\ = \delta_{\alpha,\alpha'}\delta_{n,n'}\delta_{\sigma,\sigma'}\delta[k_n^\alpha(\varepsilon_x) - k_{n'}^{\alpha'}(\varepsilon'_x)]. \end{aligned} \quad (2.46)$$

A delta de Dirac tem a seguinte propriedade:

$$\delta[g(x)] = \frac{\delta(x)}{|dg(x)/dx|}. \quad (2.47)$$

Logo,

$$\begin{aligned} d_{n',\sigma'}^{\alpha'\dagger}[k_{n'}^{\alpha'}(\varepsilon'_x)]d_{n,\sigma}^\alpha[k_n^\alpha(\varepsilon_x)] + d_{n,\sigma}^\alpha[k_n^\alpha(\varepsilon_x)]d_{n',\sigma'}^{\alpha'\dagger}[k_{n'}^{\alpha'}(\varepsilon'_x)] \\ = \delta_{\alpha,\alpha'}\delta_{n,n'}\delta_{\sigma,\sigma'}\delta(\varepsilon_x - \varepsilon'_x)\frac{\hbar^2 k_n^\alpha(\varepsilon_x)}{m}. \end{aligned} \quad (2.48)$$

Agora, impomos que os operadores na nova variável ε_x sigam a relação de anti-comutação

$$d_{n',\sigma'}^{\alpha'\dagger}(\varepsilon'_x)d_{n,\sigma}^\alpha(\varepsilon_x) + d_{n,\sigma}^\alpha(\varepsilon_x)d_{n',\sigma'}^{\alpha'\dagger}(\varepsilon'_x) = \delta_{\alpha,\alpha'}\delta_{n,n'}\delta_{\sigma,\sigma'}\delta(\varepsilon_x - \varepsilon'_x). \quad (2.49)$$

Assim, para que as Eq.(2.48) e (2.49) sejam compatíveis, a seguinte definição é exigida

$$d_{n,\sigma}^\alpha[k_n^\alpha(\varepsilon_x)] \equiv \sqrt{k_n^\alpha(\varepsilon_x)\hbar^2/m} \, d_{n,\sigma}^\alpha(\varepsilon_x). \quad (2.50)$$

Outra abordagem possível seria fazer a definição da Eq.(2.50) previamente e concluir que a mesma satisfaz à relação de comutação da Eq.(2.49). Da relação de de Broglie, em que o momentum é $\hbar k$, tiramos que o fator $\frac{1}{\sqrt{k\hbar^2/m}}$ corresponde a 1 sobre a raiz de $\hbar v$, em que v é a velocidade. Podemos escrever os operadores de campo do lado esquerdo como

$$\begin{aligned} \Psi(x \leq -d/2, y, z; t) = & \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \int_{\frac{eV}{2}}^{+\infty} d\varepsilon_x \sum_{n=1}^{M(\varepsilon_x)} e^{-iEt/\hbar} \chi_n(y, z) \\ & \times \left\{ \frac{1}{\sqrt{k_n^L \hbar^2/m}} e^{ik_n^L(\varepsilon_x)x} d_{n,\sigma}^L(\varepsilon_x) \right. \\ & + \frac{1}{\sqrt{k_n^L \hbar^2/m}} e^{-ik_n^L(\varepsilon_x)x} r_{LL}^L(\varepsilon_x) d_{n,\sigma}^L(\varepsilon_x) \\ & \left. + \frac{1}{\sqrt{k_n^R \hbar^2/m}} e^{-ik_n^L(\varepsilon_x)x} t_{RL}^R(\varepsilon_x) d_{n,\sigma}^R(\varepsilon_x) \right\}. \end{aligned} \quad (2.51)$$

O operador de corrente elétrica é obtido de

$$I(x, t) \equiv \frac{\hbar e}{2im} \int dy dz \left[\Psi^\dagger(\mathbf{r}, t) \frac{\partial \Psi}{\partial x}(\mathbf{r}, t) - \frac{\partial \Psi^\dagger}{\partial x}(\mathbf{r}, t) \Psi(\mathbf{r}, t) \right]. \quad (2.52)$$

Utilizaremos a relação de ortonormalidade das funções de onda transversais, Eq.(2.20), que eliminará um dos índices criados na multiplicação dos operadores de campo. Além disso, faremos a aproximação $k_n^\alpha(\varepsilon_x) \approx k_n^\alpha(\varepsilon'_x)$, para as exponenciais, segundo a qual a velocidade dos elétrons não deve variar muito com a energia no intervalo $(\frac{eV}{2}, \mu_L)$ (interior da esfera de Fermi). Desta forma, estamos excluindo a dependência com a posição $x \leq -d/2$, para o operador de corrente do lado esquerdo. Em outras palavras, os canais se estendem dos contatos aos reservatórios, sem variação expressiva de sua ocupação com a distância em relação à origem (amostra). Então, obtemos

$$\begin{aligned} \langle I_L(t) \rangle = & \frac{\hbar e}{im} \frac{1}{2\pi} \sum_{\sigma', \sigma} \int_{\frac{eV}{2}}^{+\infty} d\varepsilon'_x \int_{\frac{eV}{2}}^{+\infty} d\varepsilon_x \sum_{n=1}^{M(\varepsilon_x)} e^{i(E' - E)t/\hbar} \\ & \times \left[ik_n^L(\varepsilon_x) \frac{1}{\sqrt{k_n^L(\varepsilon'_x) \hbar^2/m}} \frac{1}{\sqrt{k_n^L(\varepsilon_x) \hbar^2/m}} \left\langle d_{n,\sigma'}^{L\dagger}(\varepsilon'_x) d_{n,\sigma}^L(\varepsilon_x) \right\rangle \right. \\ & - ik_n^L(\varepsilon_x) |r_{LL}(\varepsilon_x)|^2 \frac{1}{\sqrt{k_n^L(\varepsilon'_x) \hbar^2/m}} \frac{1}{\sqrt{k_n^L(\varepsilon_x) \hbar^2/m}} \left\langle d_{n,\sigma'}^{L\dagger}(\varepsilon'_x) d_{n,\sigma}^L(\varepsilon_x) \right\rangle \\ & \left. - ik_n^L(\varepsilon_x) |t_{RL}(\varepsilon_x)|^2 \frac{1}{\sqrt{k_n^R(\varepsilon'_x) \hbar^2/m}} \frac{1}{\sqrt{k_n^R(\varepsilon_x) \hbar^2/m}} \left\langle d_{n,\sigma'}^{R\dagger}(\varepsilon'_x) d_{n,\sigma}^R(\varepsilon_x) \right\rangle \right]. \end{aligned} \quad (2.53)$$

Nesta expressão, omitimos os termos do tipo $\langle d^{\alpha\dagger} d^{\beta \neq \alpha} \rangle$ em que há criação e aniquilação de elétrons em reservatórios distintos, pois devemos lembrar que há uma fase aleatória entre eles que não se cancela. Isto está associado à suposição de reservatórios incoerentes entre si. O valor esperado de um termo deste tipo é naturalmente zero, pois seu valor esperado corresponde à soma de infinitos vetores de mesmo módulo no plano complexo, cada um com uma fase aleatória. Um par de operadores de criação e aniquilação de elétrons no mesmo reservatório é chamado de operador número, pois seu autovalor é o número de elétrons no canal correspondente. Seu valor esperado é a distribuição de elétrons neste canal:

$$\left\langle d_{n',\sigma'}^{\alpha\dagger}(\varepsilon'_x) d_{n,\sigma}^\alpha(\varepsilon_x) \right\rangle = \delta_{\alpha,\alpha'} \delta_{n,n'} \delta_{\sigma,\sigma'} \delta(\varepsilon_x - \varepsilon'_x) F(\varepsilon_x + \epsilon_n - \mu_\alpha), \quad (2.54)$$

em que F é a função de Fermi, definida como na Eq.(2.29), independente da polarização de spin. Em seguida, utilizaremos a unitariedade da matriz de espalhamento, dada pela Eq.(2.34), e a propriedade de reversibilidade temporal

$$t_{RL}(\varepsilon_x) \frac{k_n^L(\varepsilon_x)}{k_n^R(\varepsilon_x)} = t_{LR}(\varepsilon_x) \frac{k_n^R(\varepsilon_x)}{k_n^L(\varepsilon_x)} \equiv T(\varepsilon_x, V), \quad (2.55)$$

o que pode ser traduzido como uma propriedade de simetria da matriz de espalhamento:

$$s_{RL,n} = s_{LR,n}. \quad (2.56)$$

A dependência com a voltagem está implícita nos índices L e R , pois estamos considerando um potencial quântico que inclui a distorção devido à diferença de potencial entre os lados direito e esquerdo, como na Fig.(2.2). A Eq.(2.53) se torna

$$\langle I_L \rangle = \frac{2e}{2\pi\hbar} \int_{\frac{eV}{2}}^{+\infty} d\varepsilon_x \sum_{n=1}^{M(\varepsilon_x)} [F(\varepsilon_x + \epsilon_n - \mu_L) - F(\varepsilon_x + \epsilon_n - \mu_R)] T(\varepsilon_x, V), \quad (2.57)$$

Veja que a dependência temporal desapareceu naturalmente, o que significa que a corrente é estacionária. Isto aconteceu com o surgimento da delta de Dirac $\delta(\varepsilon'_x - \varepsilon_x)$, vinda da Eq.(2.54), no integrando da Eq.(2.53). Esta delta de Dirac é responsável por anular o argumento da exponencial $e^{i(E' - E)t/\hbar}$, eliminando a dependência temporal. Num sistema real, o número de modos acessíveis pode ser facilmente sintonizado através da voltagem de *gate*, como demonstrado por van Wees *et al.*¹⁴, através do resultado da Fig.(1.2). No caso de apenas um canal de propagação acessível, $M(\varepsilon_x) = 1$ e podemos impor $\epsilon_1 = 0$ (equivalente a redefinir o zero de energia), de forma que

$$\langle I_L \rangle = \frac{2e}{2\pi\hbar} \int_{\frac{eV}{2}}^{+\infty} d\varepsilon_x [F(\varepsilon_x - \mu_L) - F(\varepsilon_x - \mu_R)] T(\varepsilon_x, V). \quad (2.58)$$

Este é o mesmo resultado que obtivemos na Seq.(2.2), Eq.(2.41); partindo de funções de onda em primeira quantização e calculando correntes em que se já havia implicitamente calculado o seu valor esperado.

Aqui, pudemos apreciar o desenvolvimento do formalismo a partir de operadores que criam e aniquilam elétrons em estados de espalhamento. Estes operadores ditam a ocupação dos canais, obedecendo naturalmente ao princípio de exclusão de Pauli. É necessário, no entanto, que estes canais tenham energias não coincidentes. No caso de interesse deste trabalho, em que o elétron incidente pode trocar energia com o potencial quântico, existirão inúmeras coincidências em energia entre canais de espalhamento distintos. Mostraremos na Seq.(4.2) que se faz necessário o uso de um método auto-consistente, que leva em conta distribuições fora do equilíbrio para a ocupação destes canais.

2.4 Exemplo - O Potencial Delta de Dirac

Exemplificaremos a aplicação da fórmula de Landauer, através do potencial delta de Dirac⁴⁰. Isto servirá como base para discussões posteriores acerca do potencial delta de Dirac acoplado a uma coordenada harmônica. Primeiramente, obteremos a probabilidade de transmissão através do potencial delta sem a aplicação de uma diferença potencial. Então, discutiremos o efeito da inclusão desta diferença e calcularemos a corrente elétrica no sistema. Veremos que para voltagens baixas (eV menor que metade da energia de Fermi), a diferença de potencial pode ser desprezada no potencial quântico, pois neste regime os números de onda à direita e à esquerda do potencial (k_R e k_L) são praticamente indistinguíveis. Neste caso, a voltagem entra no problema somente através dos deslocamentos em energia das populações de elétrons nos reservatórios, como na Fig.(2.2).

2.4.1 Espalhamento Através do Potencial Delta de Dirac

Consideraremos o transporte em uma dimensão (direção do eixo x). A equação de Schrödinger incluirá um potencial delta de Dirac de intensidade μb , simétrico com relação a $x = 0$ (não haverá diferença de potencial entre os lados esquerdo e direito):

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) + \mu b \delta(x) \psi(x) = \varepsilon_x \psi(x), \quad (2.59)$$

em que b é uma constante com unidades de distância, de forma que $b\delta(x)$ seja adimensional e μ tenha unidade de energia. Começaremos discutindo o caso de um elétron ligado ao potencial delta atrativo ($\mu < 0$). Nesta situação, as soluções não se propagam, ou seja,

$$\psi(x \leq 0) = Ae^{\kappa x} \quad \text{e} \quad (2.60)$$

$$\psi(x > 0) = Be^{-\kappa x}, \quad \kappa \in \mathbb{R}. \quad (2.61)$$

Impondo a continuidade da função de onda:

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0^-} \psi(x) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \psi(x), \quad (2.62)$$

obtemos a relação entre amplitudes $A = B$. Integrando a Eq.(2.59) de $-\epsilon$ a $+\epsilon$, com $\epsilon \rightarrow 0$, temos a condição de descontinuidade da função de onda:

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \frac{d}{dx} \psi(x) - \lim_{\epsilon \rightarrow 0^-} \frac{d}{dx} \psi(x) = \frac{2m}{\hbar^2} \mu \psi(0), \quad (2.63)$$

que nos leva à relação entre κ e $|\mu|$:

$$\kappa = \frac{mb}{\hbar^2} |\mu|. \quad (2.64)$$

Aplicando $x \neq 0$ à Eq.(2.59) e utilizando a função de onda como dada nas Eq.(2.60) e (2.61), obtemos a energia de estado ligado

$$\varepsilon_{lig} = -\frac{mb^2}{2\hbar^2} |\mu|^2. \quad (2.65)$$

Neste caso, ε_{lig} é sempre menor que zero. Assim, não será possível que um elétron incidente fique preso ao potencial, pois sua energia cinética é sempre positiva. Veremos, mais tarde, que ao acoplar a delta de Dirac a um oscilador harmônico, os estados ligados se tornam acessíveis através de processos virtuais, em que o elétron se liga ao potencial por um tempo finito.

Agora, resolveremos o problema de um elétron incidente com energia positiva para uma intensidade μ genérica, positiva ou negativa. Utilizaremos o método da função de Green para descrever o resultado da onda espalhada pelo potencial delta como uma onda plana não-perturbada mais um termo de perturbação (Equação de Lippmann-Schwinger).³⁵ Porém, é importante destacar aqui que a solução obtida é exata, já que a delta de Dirac permite calcular sem aproximações a integral que descreve o termo de perturbação. O método da função de Green é bastante sofisticado para o presente exemplo, mas será importante no caso em que o potencial é capaz de trocar energia com o elétron incidente. Estamos, portanto, trilhando um caminho semelhante àquele que será usado para um potencial mais complexo, por motivos de clareza e coerência.

O Hamiltoniano será dividido em um Hamiltoniano não-perturbado $H_0 = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ e uma perturbação $H' = \mu b \delta(x)$. A solução do Hamiltoniano não perturbado, $|\varphi^{(0)}\rangle$, projetada na base das posições, é uma onda-plana

$$\langle x | \varphi^{(0)} \rangle = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{ikx}, \quad (2.66)$$

com número de onda

$$k(\varepsilon_x) = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} \varepsilon_x}. \quad (2.67)$$

A equação de Lippmann-Schwinger³⁵ nos dá que a solução perturbada (*ingoing* ou *outgoing*) é a soma da solução na ausência da perturbação mais a evolução sob o efeito da perturbação:

$$|\varphi^{(\pm)}\rangle = |\varphi^{(0)}\rangle + G_0^{(\pm)} H' |\varphi^{(\pm)}\rangle. \quad (2.68)$$

A função de Green é dada por uma equação em que a fonte é puntual:

$$[\varepsilon_x - H_0 \pm i\epsilon] G_0^{(\pm)} = \mathbb{1} \quad , \quad \epsilon \rightarrow 0^+; \quad (2.69)$$

sendo que o termo $i\epsilon$ serve para deslocar os pólos da origem. Projetando a Eq.(2.68) na base das posições e usando a relação de completeza nessa mesma base, obtemos

$$\varphi^{(\pm)}(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{ikx} + \int_{-L/2}^{L/2} dx' G_0^{(\pm)}(x - x') H'(x') \varphi^{(\pm)}(x'), \quad (2.70)$$

em que $\varphi^{(\pm)}(x) \equiv \langle x | \varphi^{(\pm)} \rangle$, $H'(x') \equiv \langle x' | H' | x' \rangle = \mu b \delta(x')$ e

$$G_0^{(\pm)}(x - x') \equiv \langle x | G_0^{(\pm)} | x' \rangle = \frac{L}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dk' \frac{\langle x | k' \rangle \langle k' | x' \rangle}{\left(\varepsilon_x - \frac{\hbar^2 k'^2}{2m} \pm i\epsilon \right)}. \quad (2.71)$$

Podemos reescrever a Eq.(2.71) convenientemente, para fácil identificação dos pólos do integrando no plano complexo:

$$G_0^{(\pm)}(x - x') = -\frac{2m}{\hbar^2} \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dk' \frac{e^{ik'(x-x')}}{(k' - \kappa_A^\pm) (k' - \kappa_B^\pm)}, \quad (2.72)$$

em que utilizamos $\varepsilon_x = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ e definimos

$$\kappa_A^\pm \equiv + \left(k \pm \frac{im}{\hbar^2 k} \epsilon \right) \quad \text{e} \quad \kappa_B^\pm \equiv - \left(k \pm \frac{im}{\hbar^2 k} \epsilon \right) = -\kappa_A^\pm. \quad (2.73)$$

Note que o denominador na Eq.(2.72) inclui termos de ordem ϵ^2 , enquanto o denominador na Eq.(2.71) não. No entanto, estes termos não afetam o cálculo, já que $\epsilon \rightarrow 0^+$. A integral da Eq.(2.72) pode ser resolvida no plano complexo, mudando a variável k' para uma variável $z = z_r + iz_i = |z|e^{i\theta}$ complexa:

$$\begin{aligned} G_0^{(\pm)}(x - x') &= -\frac{2m}{\hbar^2} \frac{1}{2\pi} \int_{l_\alpha} dz_r \frac{e^{iz_r(x-x')}}{(z_r - \kappa_A^\pm) (z_r - \kappa_B^\pm)} \\ &\quad - \frac{2m}{\hbar^2} \frac{1}{2\pi} \int_{C_\alpha} d\theta \frac{e^{iR\cos\theta(x-x')}}{(z - \kappa_A^\pm) (z - \kappa_B^\pm)} \\ &\quad - \frac{2m}{\hbar^2} \frac{1}{2\pi} \int_{C_\alpha} d\theta \frac{e^{-R\sin\theta(x-x')}}{(z - \kappa_A^\pm) (z - \kappa_B^\pm)}, \end{aligned} \quad (2.74)$$

em que $\kappa_A^\pm$ e $\kappa_B^\pm$ são pólos, deslocados verticalmente do eixo real de $\frac{m}{\hbar^2 k} \epsilon$, como mostrado

na Fig.(2.3). O caminho α , composto por l_α e C_α , e o sinal de $(x - x')$ devem ser escolhidos convenientemente, de modo que $\exp[-R\sin\theta(x - x')]$ vá para zero a medida que R tende a infinito. Para $x > x'$, isto é obtido através de $\theta \in (0, \pi)$, o que corresponde aos caminhos 1 e 3 da Fig.(2.3). Já para $x < x'$, isto é obtido através de $\theta \in (\pi, 2\pi)$, o que corresponde aos caminhos 2 e 4. Nesta situação, é possível utilizar o teorema dos resíduos⁴¹, que nos leva à expressão

$$G_0^{(\pm)}(x - x') = \frac{m}{ik\hbar^2} e^{\pm ik|x-x'|}, \quad (2.75)$$

a qual compreende os 4 possíveis caminhos, através do módulo no argumento da exponencial. Substituindo o resultado da Eq.(2.75) em (2.70),

$$\varphi^{(\pm)}(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{ikx} + \frac{m}{ik\hbar^2} e^{\pm ik|x|} \mu b \varphi^{(\pm)}(0). \quad (2.76)$$

Podemos identificar $\varphi^{(\pm)}(0)$ como a amplitude da solução sob efeito da perturbação

Figura 2.3 – Possíveis caminhos fechados da integral contida na Eq.(2.74) no plano complexo e os pólos das soluções (+) e (-), em vermelho.

$H' = \mu b \delta(x)$, já que $\varphi^{(\pm)}(0)$ é a solução perturbada em $x = 0$. Definimos esta amplitude como $\frac{a}{\sqrt{L}}$. Então,

$$\varphi^{(\pm)}(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{ikx} + \frac{m}{ik\hbar^2} e^{\pm ik|x|} \mu b \frac{a}{\sqrt{L}}. \quad (2.77)$$

Se escolhermos $x = 0$ na Eq.(2.77) e fazemos novamente a identificação $\varphi^{(\pm)}(0) = \frac{a}{\sqrt{L}}$, temos automaticamente uma equação para a amplitude a :

$$a = 1 + \frac{m}{ik\hbar^2} \mu b a. \quad (2.78)$$

Resolvendo a Eq.(2.78) para a variável a e substituindo na Eq.(2.77)

$$\varphi^{(\pm)}(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{ikx} + \left(\frac{\frac{m}{ik\hbar^2} \mu b}{1 - \frac{m}{ik\hbar^2} \mu b} \right) \frac{1}{\sqrt{L}} e^{\pm ik|x|}. \quad (2.79)$$

Da Eq.(2.79, analisando $\varphi^{(-)}(x)$ à esquerda e à direita do potencial, vemos que o termo de perturbação (termo proporcional a $e^{-ik|x|}$) corresponde a ondas parciais “entrando” no potencial. A solução esperada fisicamente é $\varphi^{(+)}(x)$, em que o termo de perturbação (termo proporcional a $e^{+ik|x|}$) corresponde a ondas parciais saindo do potencial.[†] Identificamos, para $x < 0$, a onda incidente $\frac{1}{\sqrt{L}} e^{ikx}$ e a refletida $\frac{r}{\sqrt{L}} e^{-ikx}$ e, para $x > 0$, a onda transmitida $\frac{t}{\sqrt{L}} e^{ikx}$; em que definimos

$$t \equiv \frac{ik}{ik - \left(\frac{mb}{\hbar^2}\right) \mu} \quad \text{e} \quad r \equiv \frac{\left(\frac{mb}{\hbar^2}\right) \mu}{ik - \left(\frac{mb}{\hbar^2}\right) \mu}, \quad (2.80)$$

e estamos supondo k real (ondas propagantes). As probabilidades de transmissão e reflexão são obtidas do módulo ao quadrado de t e r , respectivamente:

$$T = |t|^2 = \frac{k^2}{k^2 + \left(\frac{mb}{\hbar^2}\right)^2 \mu^2} \quad \text{e} \quad R = |r|^2 = \frac{\left(\frac{mb}{\hbar^2}\right)^2 \mu^2}{k^2 + \left(\frac{mb}{\hbar^2}\right)^2 \mu^2}, \quad (2.81)$$

já que o número de onda é o mesmo dos dois lados do potencial ($k_L = k_R = k$). Podemos verificar facilmente que $T + R = 1$, o que significa que há conservação de probabilidade. Isto é melhor apreciado através da Fig.(2.4), em que as curvas de T e R *versus* a energia de incidência possuem comportamento complementar e nunca ultrapassam a unidade. Além disso, T e R são indiferentes ao sinal de μ . Esta é uma propriedade quântica, já que uma partícula clássica com energia positiva não conseguiria passar por uma barreira infinita ($T = 0$ e $R = 1$), mesmo que infinitamente estreita como a delta, mas conseguiria passar por um poço infinitamente fundo e estreito sem senti-lo ($T = 1$ e $R = 0$)⁴⁰. Para construir a Fig.(2.4) fizemos uma mudança de variáveis em que a energia é expressa em unidades da intensidade do potencial, $|\mu|$. Para tanto, dividimos a equação de Schrödinger, Eq.(2.59), por $|\mu|$ e mudamos a variável x por $\tilde{x}x_0$:

$$-\frac{1}{2} \frac{\hbar^2}{m|\mu|x_0^2} \frac{d^2}{d\tilde{x}^2} \psi(\tilde{x}) + \text{sign}(\mu) \frac{b}{x_0} \delta(\tilde{x}) \psi(\tilde{x}) = \frac{\varepsilon_x}{|\mu|} \psi(\tilde{x}), \quad (2.82)$$

em que $\text{sign}(\mu)$ é o sinal de μ . Escolhendo $x_0 = \sqrt{\frac{\hbar^2}{m|\mu|}}$ e $\tilde{b} \equiv \frac{b}{x_0} = 1$, obtemos

$$-\frac{1}{2} \frac{d^2}{d\tilde{x}^2} \psi(\tilde{x}) + \text{sign}(\mu) \delta(\tilde{x}) \psi(\tilde{x}) = \frac{\varepsilon_x}{|\mu|} \psi(\tilde{x}). \quad (2.83)$$

[†]Estamos dividindo a solução em ondas “entrando” (*ingoing*) e “saindo” (*outgoing*) do potencial à semelhança do que se costuma fazer em problemas de espalhamento em 3 dimensões. Neste caso, a onda “entrando” no potencial é a onda plana incidente e a onda “saindo” é a onda espalhada nas 3 dimensões.

Figura 2.4 – Probabilidades de transmissão e reflexão contra a energia de incidência longitudinal do elétron, em unidades da intensidade do potencial, $|\mu|$, em que escolhemos $\tilde{b} = 1$.

Isto é equivalente a fazer $b\mu = \pm 1$, $\hbar = 1$ e $m = 1$, diretamente na Eq.(2.59). Na Eq.(2.83), a energia logitudinal do elétron incidente fica dividida por $|\mu|$. Então, expressaremos as energias envolvidas em nosso problema sempre em unidades deste parâmetro, por exemplo a energia de Fermi será expressa como $\frac{\varepsilon_F}{|\mu|}$. A mudança para a variável $\tilde{x}$ é o mesmo que reescalar a distância longitudinal. As probabilidades de transmissão através da delta, que são o que nos interessa no contexto do formalismo de Landauer, não dependem da escala em x . Logo, nossos resultados serão indiferentes à escolha de x_0 . Note, no entanto, que x_0 depende de $|\mu|$. Isto não é um problema, pois estamos supondo em toda a dissertação um potencial específico com um dado μ fixo, por exemplo $\mu = 1\text{meV}$. Desta forma, os valores de x_0 e b também ficam fixados. Se quiséssemos comparar nossos resultados com o de um potencial quântico com uma intensidade $b'\mu'$ diferente de $b\mu$, deveríamos alterar nossa escala para $x'_0 = \sqrt{\frac{\hbar^2}{m|\mu'|}}$, com $x = x'_0\tilde{x}'$. Deste modo, teríamos

$$-\frac{1}{2}\frac{d^2}{d\tilde{x}'^2}\psi(\tilde{x}') + \text{sign}(\mu')\frac{b'}{x'_0}\delta(\tilde{x}')\psi(\tilde{x}') = \frac{\varepsilon_x}{|\mu'|}\psi(\tilde{x}'), \quad (2.84)$$

em que a diferença fundamental em relação à Eq.(2.83), além da mudança de escala em x , está nos fatores $\text{sign}(\mu')\frac{b'}{x'_0}$ e $\frac{\varepsilon_x}{|\mu'|}$. Todavia, não faremos este tipo de comparação no presente trabalho, mantendo $b\mu$ fixo.

A mudança de unidades descrita para o potencial delta de Dirac se assemelha àquela feita no contexto do átomo de hidrogênio. Neste caso, a equação de Schrödinger de um elétron no átomo de hidrogênio é dividida pela energia de Rydberg E_{Ry} e faz-se a mudança $r = a_0\tilde{r}$, em que a_0 é o raio do átomo de hidrogênio. E_{Ry} e a_0 possuem uma relação bem conhecida, que pode ser tirada do modelo de Bohr. Esta relação é similar a que obtemos entre μ e x_0 , a qual permite simplificar a equação de Schrödinger. Nós identificamos tal

problema como sendo o do átomo de hidrogênio, porém isto é muito mais geral. Uma equação de Schödinger similar pode ser escrita para qualquer outro sistema ligado de duas partículas de cargas opostas, com uma distância característica a'_0 identificada como sendo o raio e uma energia de ligação E'_{Ry} .[‡] No caso da mudança de unidades de nosso problema acontece o mesmo: modificando as características do potencial quântico, no caso $b\mu$, estamos alterando a escala de distância x_0 .

2.4.2 Discussão para o Caso em que Há Voltagem Aplicada

Agora, introduziremos a diferença de potencial entre os lados esquerdo ($x < 0$) e direito ($x > 0$) do potencial delta de Dirac para o cálculo da corrente elétrica. Consideraremos que o potencial do lado esquerdo foi elevado de $\frac{eV}{2}$, enquanto o do lado direito foi abaixado da mesma quantidade. Desta forma, estamos criando uma diferença de potencial total de V . O potencial quântico será então o da delta de Dirac, $\mu b\delta(x)$, sobreposto a um potencial degrau, como na Fig.(2.5):

$$V(x) = \mu b\delta(x) - \frac{eV}{2}\Theta(x) + \frac{eV}{2}\Theta(-x), \quad (2.85)$$

sendo Θ a função de Heaviside, definida por

$$\Theta(x < 0) = 0, \quad (2.86)$$

$$\Theta(x = 0) = \frac{1}{2} \quad (2.87)$$

e

$$\Theta(x > 0) = 1 \quad (2.88)$$

Então, a função de onda do lado direito deve carregar um número de onda, na direção x ,

$$k_L(\varepsilon_x, V) = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} \left(\varepsilon_x - \frac{eV}{2} \right)}, \quad (2.89)$$

[‡]Em um problema de um cristal infinito, os estados eletrônicos das impurezas são descritos através de estados hidrogênicos, em que o raio de Bohr efetivo é $a'_0 = \frac{\kappa\hbar^2}{m^*e^2}$. κ é a constante dielétrica relativa do material e m^* a massa efetiva do elétron no cristal. Em GaAs, o raio de Bohr efetivo é $a'_0 \sim 100\text{\AA}$, contra $0.5\text{\AA}$ do átomo de hidrogênio. A energia de Rydberg efetiva é $E'_{\text{Ry}} = \frac{1}{2} \frac{m^*e^4}{\kappa^2\hbar^2} \sim 5.5\text{meV}$ para este mesmo material, contra 13.6eV do átomo de hidrogênio.²⁴

Figura 2.5 – Perfil do potencial quântico composto por uma delta de Dirac sobreposto a um potencial degrau. Este último é o que descreve a diferença de potencial entre os dois lado da amostra, devido a uma voltagem aplicada de V .

que depende da energia longitudinal e da voltagem aplicada. Da mesma forma, do lado direito,

$$k_R(\varepsilon_x, V) = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} \left(\varepsilon_x + \frac{eV}{2} \right)}. \quad (2.90)$$

Para simplificar a discussão, nos restringiremos a analisar a transmissão da esquerda para a direita do potencial, imaginando uma onda incidente originária do lado esquerdo:

$$\psi(x < 0) = Ae^{ik_L x} + Be^{-ik_L x} \quad (2.91)$$

e

$$\psi(x > 0) = Ce^{ik_R x}. \quad (2.92)$$

Das condições de continuidade e descontinuidade (Eq.(2.63)) da função de onda, obtemos a amplitude da onda transmitida, C . Então, calculamos a probabilidade de transmissão a partir da razão entre as correntes de probabilidade transmitida e incidente em $x = 0$, obtendo

$$T_{LR}(\varepsilon_x, V) = \frac{4k_L(\varepsilon_x, V)k_R(\varepsilon_x, V)}{[k_L(\varepsilon_x, V) + k_R(\varepsilon_x, V)]^2 + 4\left(\frac{mb}{\hbar^2}\right)^2 \mu^2}. \quad (2.93)$$

Note que no caso em que $\mu = 0$ (ausência do potencial delta), recuperamos a probabilidade de transmissão devido somente à diferença de potencial entre os lados direito e esquerdo da origem, dada pela Eq.(2.81). Se, adicionalmente, eliminarmos esta diferença de potencial escolhendo $V = 0$, obtemos probabilidade de transmissão igual a 1. Além disso, o resultado é simétrico com relação ao sinal de μ , já que T_{LR} só depende de μ^2 ; e há o respeito à reversibilidade temporal, já que nada muda se trocarmos L por R na Eq.(2.93) ($T_{LR} = T_{RL}$). Esta última propriedade nos diz que o problema de uma onda incidente pelo lado esquerdo do potencial sendo transmitida para o lado direito deve ser equivalente àquele da onda temporalmente reversa (incidente pelo lado direito e transmitida para o esquerdo), em termos dos elementos da matriz de espalhamento ($\mathbf{t}' = \mathbf{t}$ na Eq.(2.4)). O gráfico

da Fig.(2.6) nos mostra que a probabilidade de transmissão cresce com a energia de incidência longitudinal, nunca ultrapassando a unidade; similarmente à Fig.(2.4), em que não há voltagem aplicada. Abaixo de metade da voltagem aplicada o número de onda do lado esquerdo, k_L , é imaginário. Quando isto acontece, a corrente de probabilidade incidente é nula, logo não há transmissão (probabilidade de transmissão nula), como nos demonstra a curva da Fig.(2.6).

Figura 2.6 – Probabilidade de transmissão da esquerda para a direita ($L \rightarrow R$) contra a energia de incidência longitudinal do elétron. Neste caso, estamos imaginando uma diferença de potencial entre os dois lados de eV . Escolhemos $\tilde{b} = 1$ e $eV/|\mu| = 2$. Esta probabilidade é nula abaixo de $eV/(2|\mu|) = 1$, quando não há transmissão (k_L é imaginário).

2.4.3 Cálculo da Corrente Elétrica

Aqui, a amostra é descrita pela delta de Dirac sobreposta a uma queda de eV na origem, como na Fig.(2.5). Assim, o comprimento longitudinal d que aparece na Fig.(2.2) é tomado como sendo nulo. Similarmente à situação representada na Fig.(2.2), consideramos populações de elétrons de cada lado do potencial pontual deslocadas de $\frac{eV}{2}$ da origem de energia, como mostrado na Fig.(2.7). Estas populações estavam inicialmente cheias até a energia de Fermi ε_F , para o caso de temperatura muito menor que a temperatura de Fermi (energia de Fermi sobre a constante de Boltzmann), a partir da origem de energia. Faremos toda a discussão para este regime de temperaturas, quando as distribuições de Fermi podem ser aproximadas para funções de Heaviside. Após o deslocamento devido à voltagem, a população da direita é preenchida de $\frac{eV}{2}$ a $\varepsilon_F + \frac{eV}{2}$. Da mesma forma, a população da esquerda, passa a ser preenchida de $-\frac{eV}{2}$ a $\varepsilon_F - \frac{eV}{2}$. Desta forma, a corrente

Figura 2.7 – Distribuições de elétrons nos dois lados do potencial delta de Dirac, com $eV < \varepsilon_F$. À direita encontra-se elevada de $\frac{eV}{2}$ e à esquerda abaixada do mesmo valor, a partir da origem. A diferença de potencial total é de eV . O potencial químico à esquerda passa de ε_F para $\varepsilon_F + \frac{eV}{2}$, com a aplicação da voltagem. Da mesma forma, à direita passa de ε_F para $\varepsilon_F - \frac{eV}{2}$.

elétrica segundo a fórmula de Landauer, Eq.(2.41), será dada por

$$\frac{I}{i_0} = \int_{\frac{eV}{2}}^{+\infty} d\varepsilon_x T_{LR}(\varepsilon_x, V) \left[F\left(\varepsilon_x - \varepsilon_F - \frac{eV}{2}\right) - F\left(\varepsilon_x - \varepsilon_F + \frac{eV}{2}\right) \right], \quad (2.94)$$

em que $i_0 \equiv \frac{2e}{h}$ é a unidade fundamental de corrente elétrica, chamada de constante de Josephson. Para $eV < \varepsilon_F$, observamos na Fig.(2.7) uma faixa de energia em que há intersecção entre as duas populações, de modo que um número igual de elétrons caminham em sentidos opostos nesta faixa. Assim, o integrando na Eq.(2.94) é não-nulo a partir de $\varepsilon_x = \varepsilon_F - \frac{eV}{2}$ e vai até $\varepsilon_F + \frac{eV}{2}$, se aproximamos as funções de Fermi para funções de Heaviside:

$$\frac{I}{i_0} = \int_{\varepsilon_F - \frac{eV}{2}}^{\varepsilon_F + \frac{eV}{2}} d\varepsilon_x T_{LR}(\varepsilon_x, V), \quad eV < \varepsilon_F. \quad (2.95)$$

Para o caso em que $eV > \varepsilon_F$, caímos na situação da Fig.(2.8), em que não há mais intersecção entre as populações. Então, integramos a partir da energia cinética longitudinal mínima que os elétrons da esquerda podem assumir, $\frac{eV}{2}$:

$$\frac{I}{i_0} = \int_{\frac{eV}{2}}^{\varepsilon_F + \frac{eV}{2}} d\varepsilon_x T_{LR}(\varepsilon_x, V), \quad eV > \varepsilon_F. \quad (2.96)$$

Mudando a variável de integração de ε_x para $\varepsilon'_x = \varepsilon_x - \frac{eV}{2}$, obtemos

$$\frac{I}{i_0} = \int_{\varepsilon_F - eV}^{\varepsilon_F} d\varepsilon'_x T_{LR}(\varepsilon'_x, V), \quad eV < \varepsilon_F; \quad (2.97)$$

Figura 2.8 – Esquema das distribuições de elétrons nos dois lados do potencial delta de Dirac similar ao da Fig.(2.7), mas com $eV > \varepsilon_F$.

e

$$\frac{I}{i_0} = \int_0^{\varepsilon_F} d\varepsilon'_x T_{LR}(\varepsilon'_x, V), \quad eV > \varepsilon_F; \quad (2.98)$$

em que $T_{LR}(\varepsilon'_x, V)$ é dado por

$$T_{LR}(\varepsilon'_x, V) = \frac{4k_L(\varepsilon'_x)k_R(\varepsilon'_x, V)}{[k_L(\varepsilon'_x) + k_R(\varepsilon'_x, V)]^2 + 4\left(\frac{mb}{\hbar^2}\right)^2 \mu^2}, \quad (2.99)$$

e os números de onda longitudinais, feita a mudança para a variável ε'_x , são

$$k_L(\varepsilon'_x) = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} \varepsilon'_x} \quad (2.100)$$

e

$$k_R(\varepsilon'_x, V) = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (\varepsilon'_x + eV)}. \quad (2.101)$$

Isto é equivalente a um problema em que apenas o potencial do lado direito da origem é deslocado para baixo de eV . Na Fig.(2.9), mostramos a probabilidade de transmissão contra a voltagem aplicada, feita a escolha $\varepsilon'_x = \frac{\varepsilon_F}{2}$ (ε'_x à metade do intervalo de integração, $[0, \varepsilon_F]$). Isto nos deve dar uma intuição de como a corrente variará com a voltagem, já que segundo a regra de integração numérica do retângulo

$$\int_a^b dx g(x) \approx (b-a)g\left(\frac{a+b}{2}\right), \quad (2.102)$$

com erro de no máximo $\frac{(b-a)}{24} \Delta^2 f''(\xi)$, para algum $\xi \in (a, b)$ e sendo Δ o tamanho do

passo da discretização. No caso da integral da Eq.(2.97),

$$\int_{\varepsilon_F - eV}^{\varepsilon_F} d\varepsilon'_x T_{LR}(\varepsilon'_x, V) \approx eV T_{LR}(\varepsilon_x = \varepsilon_F, V), \quad eV < \varepsilon_F. \quad (2.103)$$

Quando $eV \ll \varepsilon_F$,

$$\int_{\varepsilon_F - eV}^{\varepsilon_F} d\varepsilon'_x T_{LR}(\varepsilon'_x, V) \approx eV T_{LR}(\varepsilon_x = \varepsilon_F, 0), \quad eV \ll \varepsilon_F. \quad (2.104)$$

Neste regime ($eV \ll \varepsilon_F$) temos uma resposta linear da corrente elétrica com relação à voltagem aplicada. No caso da integral da Eq.(2.98),

$$\int_0^{\varepsilon_F} d\varepsilon'_x T_{LR}(\varepsilon'_x, V) \approx \varepsilon_F T_{LR}\left(\varepsilon'_x = \frac{\varepsilon_F}{2}, V\right), \quad eV > \varepsilon_F. \quad (2.105)$$

O erro desta última aproximação será tão grande quanto maior for ε_F , no entanto queremos fazer apenas a análise qualitativa. Destacamos que esta análise só valerá para $eV > \varepsilon_F$, quando valem os limites de integração da Eq.(2.98). Na Fig.(2.9), a curva em azul corresponde ao potencial composto pela delta de Dirac e a diferença de potencial descrita por um degrau, em que a probabilidade de transmissão é dada pela Eq.(2.99). As demais curvas correspondem a cada parte do potencial em separado. A curva em vermelho é a probabilidade de transmissão através do potencial delta, sem diferença de potencial, ou seja, sem diferenciação entre os lados direito e esquerdo. Esta probabilidade é dada pela Eq.(2.81), trocando da variável ε_x para $\varepsilon'_x = \varepsilon_x - \frac{eV}{2}$. Isto não significa que o potencial delta sozinho dependa da voltagem aplicada: são os limites de integração que introduzem a voltagem nesta função, quando aproximamos a integral pela regra do retângulo. A curva em verde é a probabilidade de transmissão através do potencial degrau que representa a diferença de potencial dos dois lados da origem. O comportamento da probabilidade de transmissão através do potencial composto tende aos casos dos potenciais isolados, nos limites de voltagem nula e voltagem infinita. Observamos que para voltagens baixas, o que domina é o potencial delta de Dirac, pois a diferença entre os números de onda da direita e esquerda é mínima:

$$\begin{aligned} T_{LR}\left(\varepsilon'_x = \frac{\varepsilon_F}{2}, V\right) &= \frac{4k_L\left(\varepsilon'_x = \frac{\varepsilon_F}{2}\right) k_R\left(\varepsilon'_x = \frac{\varepsilon_F}{2}, V\right)}{\left[k_L\left(\varepsilon'_x = \frac{\varepsilon_F}{2}\right) + k_R\left(\varepsilon'_x = \frac{\varepsilon_F}{2}, V\right)\right]^2 + 4\left(\frac{mb}{\hbar^2}\right)^2 \mu^2} \\ &\approx \frac{\left[k\left(\varepsilon'_x = \frac{\varepsilon_F}{2}\right)\right]^2}{\left[k\left(\varepsilon'_x = \frac{\varepsilon_F}{2}\right)\right]^2 + \left(\frac{mb}{\hbar^2}\right)^2 \mu^2}. \end{aligned} \quad (2.106)$$

Há uma transição gradual para o comportamento do potencial degrau, evidenciada pelo máximo da curva em azul. Apenas para voltagens muito altas, o potencial delta deixa de

ter importância no processo de espalhamento e quem domina é o potencial degrau:

$$\begin{aligned}
 T_{LR} \left(\varepsilon'_x = \frac{\varepsilon_F}{2}, V \right) &= \frac{4k_L \left(\varepsilon'_x = \frac{\varepsilon_F}{2} \right) k_R \left(\varepsilon'_x = \frac{\varepsilon_F}{2}, V \right)}{\left[k_L \left(\varepsilon'_x = \frac{\varepsilon_F}{2} \right) + k_R \left(\varepsilon'_x = \frac{\varepsilon_F}{2}, V \right) \right]^2 + 4 \left(\frac{mb}{\hbar^2} \right)^2 \mu^2} \\
 &\approx \frac{4k_L \left(\varepsilon'_x = \frac{\varepsilon_F}{2} \right) k_R \left(\varepsilon'_x = \frac{\varepsilon_F}{2}, V \right)}{\left[k_L \left(\varepsilon'_x = \frac{\varepsilon_F}{2} \right) + k_R \left(\varepsilon'_x = \frac{\varepsilon_F}{2}, V \right) \right]^2}.
 \end{aligned} \tag{2.107}$$

Figura 2.9 – Curvas da probabilidade de transmissão *versus* eV (em unidades da intensidade do potencial delta) através de um potencial quântico composto pela delta de Dirac sobreposta a um potencial degrau, como dado pela Eq.(2.85); e de suas partes isoladamente. A probabilidade de transmissão da delta mais degrau é dado pela Eq.(2.99); do degrau, por essa mesma equação mas com $\mu = 0$; e da delta, pela Eq.(2.81) trocando da variável ε_x para $\varepsilon'_x = \varepsilon_x - \frac{eV}{2}$. Destacamos que o comportamento do potencial composto (curva em azul) tende ao da delta (curva em vermelho) para $V \rightarrow 0$ e ao do degrau (curva em verde) para $V \rightarrow +\infty$. Isto demonstra uma competição entre os dois potenciais do sistema, fazendo com que o potencial composto transite entre os dois comportamentos, o que é evidenciado pelo ponto de máximo. Escolhemos $\varepsilon'_x = \frac{\varepsilon_F}{2} = 0.5$ em unidades de $|\mu|$. Para os casos que incluem o potencial delta de Dirac (curvas em azul e vermelho), $\tilde{b} = 1$.

Os resultados da corrente elétrica *versus* a voltagem aplicada são mostrados na Fig.(2.10). Quando atingimos a energia de Fermi ($eV = \varepsilon_F$) observamos uma mudança de comportamento. Supomos uma intensidade do potencial de 1meV e dois valores distintos de ε_F para um semiconductor: 5meV e 10meV. Esta mudança ocorre, pois a intersecção entre as duas faixas de energia das distribuições, região compreendida entre $\varepsilon_F - \frac{eV}{2}$ e $\frac{eV}{2}$ na Fig.(2.7), geram correntes contrárias que se anulam. As duas distribuições ficam completamente desalinhadas, sem qualquer intersecção entre elas, para $eV > \varepsilon_F$, como na Fig.(2.8). A partir daí, à medida que aumentamos V , a corrente elétrica tem o comportamento similar ao da Fig.(2.9). Para a delta de Dirac (curva em vermelho), a corrente é crescente a partir da energia de Fermi, pois passa a ser devido somente a elétrons indo em

Figura 2.10 – Curvas da corrente elétrica (em unidades de $i_0 \equiv \frac{2e}{h}$) *versus* eV (em unidades da intensidade do potencial delta) através de um potencial quântico composto pela delta de Dirac sobreposta a um potencial degrau, como dado pela Eq.(2.85); e de suas partes isoladamente (potencial delta e potencial degrau). Para o gráfico da esquerda, escolhemos $\varepsilon_F/|\mu| = 5$ e para o da direita, $\varepsilon_F/|\mu| = 10$. Abaixo de $\varepsilon_F/|\mu|$, o comportamento das curvas é aproximadamente linear e crescente. O comportamento linear pode ser justificado pela aproximação da integral da corrente na Eq.(2.104). O crescimento com a voltagem é devido à gradual diminuição da intersecção entre as populações dos lados direito e esquerdo, intersecção esta mostrada na Fig.(2.7). Quando a intersecção termina, uma transição é observada em $\varepsilon_F/|\mu|$, havendo uma mudança de comportamento das curvas. Acima de $\varepsilon_F/|\mu|$, o comportamento das curvas pode ser compreendido pela análise que fizemos através da aproximação da integral na Eq.(2.105) e dos resultados da Fig.(2.9). Da mesma forma, o comportamento da curva do potencial composto tende ao do potencial degrau para voltagem infinita. O máximo do potencial composto (curva em azul) é entendido como a transição do regime em que o potencial delta de Dirac domina e aquele em que o potencial degrau domina. Para os casos que incluem o potencial delta de Dirac (curvas em azul e vermelho), escolhemos $\tilde{b} = 1$. Em todos os casos estamos considerando uma temperatura muito menor que a temperatura de Fermi.

um sentido (da esquerda para a direita). Sua assíntota é ε_F , pois a Eq.(2.105) nos mostra que esse é o seu valor máximo, dado que a probabilidade de transmissão é no máximo 1. Já para o potencial degrau (curva em verde), temos um comportamento decrescente, que demonstra que o aumento da separação entre os potenciais do lado direito e esquerdo da origem tem um efeito de diminuição da corrente elétrica. A curva do potencial composto pela delta mais degrau (curva em azul) apresenta um máximo que evidencia a transição entre um comportamento dominado pela delta e pelo degrau. Para voltagens mais altas, esta curva tende ao comportamento do potencial que inclui somente o degrau, como já havíamos percebido a partir da Fig.(2.9). Na Fig.(2.11), destacamos o comportamento da corrente do potencial delta de Dirac isoladamente e do potencial composto pela delta e pelo degrau, para voltagens baixas ($eV < \varepsilon_F$). Para $eV \ll \varepsilon_F$, o comportamento é linear. Nesta região, a corrente pode ser descrita pela lei de Ohm: $I = GV$, em que G é a condutância, $ei_0T(\varepsilon_F, 0)$. Isto vem de aproximarmos a diferença de distribuições de

Fermi-Dirac, na Eq.(2.94), para uma derivada parcial na variável ε_x :

$$F\left(\varepsilon_x - \varepsilon_F + \frac{eV}{2}\right) - F\left(\varepsilon_x - \varepsilon_F - \frac{eV}{2}\right) \approx -eV \frac{\partial F}{\partial \varepsilon_x} \quad (2.108)$$

e considerarmos esta distribuição como uma função degrau, para temperatura muito pequena. Assim, $\frac{\partial F}{\partial \varepsilon_x} = -\delta(\varepsilon_x - \varepsilon_F)$ e substituindo na Eq.(2.94), obtemos $I \approx ei_0 T(\varepsilon_F, 0)V$. Destacamos que o comportamento da corrente através do potencial degrau e do potencial composto pela delta mais degrau é aproximadamente o mesmo abaixo de $\frac{\varepsilon_F}{2}$. Note que tal energia é apenas uma referência arbitrária abaixo de ε_F . Esta será a nossa justificativa para descartar a descrição de um potencial delta de Dirac que inclua o efeito da diferença de potencial através de potencial degrau, como na Eq.(2.85). Isto porque a inclusão do degrau aumentaria a dificuldade do cálculo de funções de Green para o caso em que consideramos o acoplamento com um oscilador harmônico. Por simplicidade, restringiremos nossa análise da corrente elétrica para voltagens abaixo de $\frac{\varepsilon_F}{2}$.

Figura 2.11 – Curvas da corrente elétrica (em unidades de $i_0 \equiv \frac{2e}{h}$) versus eV (em unidades da intensidade do potencial delta) menor que a energia de Fermi, $\varepsilon_F/|\mu| = 5$ (gráfico esquerdo) e 10 (gráfico direito). Mostramos a corrente associada a um potencial quântico composto pela delta de Dirac sobreposta a um potencial degrau, como dado pela Eq.(2.85); e aquela associada a uma delta de Dirac que não inclui a diferença de potencial entre seus dois lados. O comportamento é linear para $eV \ll \varepsilon_F$. Como a diferença entre os números de onda k_L e k_R é mínima neste regime, as duas curvas coincidem. Estamos considerando uma temperatura muito menor que a temperatura de Fermi e $\tilde{b} = 1$.

No próximo capítulo, Cap.(3), calcularemos de forma semelhante as probabilidades de transmissão através de um potencial delta de Dirac acoplado a um oscilador harmônico quântico. O cálculo da corrente elétrica será deixado para o capítulo de resultados, Cap.(5). A diferença mais evidente será a de que as equações para o cálculo das amplitudes, similares à Eq.(2.78), virão na forma de um sistema infinito de equações acopladas.

CAPÍTULO 3

Potencial Delta de Dirac Acoplado a uma Coordenada Harmônica

Neste capítulo, estudaremos o espalhamento em que é possível a troca de energia entre o elétron e o potencial quântico. Para tanto, utilizaremos o potencial delta de Dirac, explorado na Seq.(2.4), mas acoplado a um oscilador harmônico quântico. O equivalente clássico deste potencial é a delta de Dirac oscilante¹⁸, que apresenta resultados semelhantes àqueles que serão discutidos aqui. Os resultados mostrados no presente capítulo não são de todo originais, tendo sido explorados anteriormente.^{16–21,42} O diferencial do que é apresentado neste trabalho como um todo, com relação a essas referências, está no cálculo da corrente elétrica. Isto será feito via um formalismo que vai além de Landauer, para a contabilização correta de processos inelásticos no espalhamento, num sistema em que a amostra real pode ser descrita pelo potencial delta acoplado. No caso, a amostra corresponderá a uma camada muito fina em uma heteroestrutura semicondutora, como na Fig.(1.3). No exemplo do potencial delta de Dirac da Seq.(2.4), vimos que a inclusão, no potencial quântico, da diferença de potencial entre os lados direito e esquerdo é irrelevante para o cálculo da corrente elétrica, num regime de voltagens baixas com relação à energia de Fermi. Então, aqui optamos por ignorar o efeito da voltagem no potencial que descreve a amostra, restringindo o problema a este mesmo regime de voltagens baixas. Nossos resultados para a corrente elétrica, no Cap.(5), se basearão nas probabilidades de

transmissão do potencial quântico aqui descrito.

3.1 Hamiltoniano

Como na Seq.(2.4), faremos uso do método da Função de Green³⁵, para o cálculo dos auto-estados de espalhamento do Hamiltoniano $H = H_0 + H'$, em que

$$H_0 = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \hbar\omega a^\dagger a, \quad (3.1)$$

e

$$H' \equiv b\delta(x) [\mu + \gamma(a^\dagger + a)]. \quad (3.2)$$

Incluimos um termo de energia, $\hbar\omega a^\dagger a$, devido a um oscilador harmônico quântico de frequência ω e um termo que o acopla ao potencial delta de Dirac: $\gamma b\delta(x)(a+a^\dagger)$. Os auto-estados do Hamiltoniano não-perturbado, projetados no espaço das posições, considerando que o oscilador harmônico encontra-se inicialmente no J -ésimo modo são:

$$\langle xq | \varphi^{(0)} \rangle = \langle x | k_J \rangle \langle q | \phi_J \rangle \quad (3.3)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{L}} e^{ik_J x} \phi_J(q), \quad (3.4)$$

para elétrons incidindo pelo lado esquerdo. x e q são as coordenadas espaciais respectivamente do elétron e do oscilador harmônico. $|\phi_j\rangle$ é o auto-estado do oscilador harmônico no j -ésimo modo de oscilação, de modo que $a^\dagger a |\phi_j\rangle = j |\phi_j\rangle$. $\phi_J(q)$ é a projeção de $|\phi_J\rangle$ no espaço das posições q . A energia total, obtida quando projetamos H_0 sobre seus auto-estados, é

$$E = \frac{\hbar^2 (k_j)^2}{2m} + j\hbar\omega, \quad (3.5)$$

de onde tiramos o número de onda k_j , para um modo j qualquer:

$$k_j(E) = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (E - j\hbar\omega)}. \quad (3.6)$$

Em termos da energia longitudinal do elétron, $\varepsilon_x = E - J\hbar\omega$ (exclui-se a energia inicial do oscilador harmônico, anterior ao espalhamento):

$$k_j(\varepsilon_x) = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (\varepsilon_x - \Delta j\hbar\omega)}, \quad \Delta j \equiv j - J. \quad (3.7)$$

No caso de emissão de fônons pelo oscilador harmônico, $\Delta j < 0$ e k_j é sempre real. No caso de absorção, $\Delta j > 0$ e k_j pode ser imaginário puro para ε_x abaixo de $\Delta j\hbar\omega$. Isto

significa que os canais com $j \leq J$ estão sempre abertos, enquanto que para aqueles com $j > J$, a energia de corte é $\Delta j \hbar \omega$. Da equação de Lippmann-Schwinger³⁵, Eq.(2.68), podemos escrever o auto-estado de espalhamento como a onda incidente não-perturbada mais um termo devido à perturbação:

$$\varphi_J^{(\pm)}(x, q) = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{ik_J x} \phi_J(q) + \int dx' dq' \langle xq | G_0^{(\pm)} | x'q' \rangle H'(x', q') \varphi_J^{(\pm)}(x', q'), \quad (3.8)$$

em que $H'(x', q') \equiv \langle x'q' | H' | x'q' \rangle$ e $\varphi^{(\pm)}(x', q') \equiv \langle x'q' | \varphi^{(\pm)} \rangle$. A função de Green é definida como sendo a solução da equação com fonte pontual $[\varepsilon_x - H_0 \pm i\epsilon] G_0^{(\pm)} = \mathbb{1}$, com $\epsilon \rightarrow 0^+$. Projetando tal equação no espaço das posições:

$$\langle xq | G_0^{(\pm)} | x'q' \rangle = \frac{L}{2\pi} \sum_{j=0}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} dk'_j \frac{\langle x | k'_j \rangle \langle q | \phi_j \rangle \langle \phi_j | q' \rangle \langle k'_j | x' \rangle}{\left(E - j\hbar\omega - \frac{\hbar^2(k'_j)^2}{2m} \pm i\epsilon \right)}. \quad (3.9)$$

a Eq.(3.9) pode ser escrita como

$$\langle xq | G_0^{(\pm)} | x'q' \rangle = -\frac{2m}{\hbar^2} \frac{1}{2\pi} \sum_{j=0}^{+\infty} \phi_j(q) \phi_j(q') \int_{-\infty}^{+\infty} dk'_j \frac{e^{ik'_j(x-x')}}{(k'_j - \kappa_{A,j}^{\pm})(k'_j - \kappa_{B,j}^{\pm})}, \quad (3.10)$$

se definimos

$$\kappa_{A,j}^{\pm} \equiv + \left(k_j \pm \frac{im}{\hbar^2 k_j} \epsilon \right) \quad (3.11)$$

e

$$\kappa_{B,j}^{\pm} \equiv - \left(k_j \pm \frac{im}{\hbar^2 k_j} \epsilon \right). \quad (3.12)$$

O produto $(k'_j - \kappa_{A,j}^{\pm})(k'_j - \kappa_{B,j}^{\pm})$, no denominador da Eq.(3.10), inclui termos de segunda ordem em ϵ , enquanto o denominador na Eq.(3.9) não. Isto não é um problema, pois devemos ter em mente o limite $\epsilon \rightarrow 0^+$. A integral da Eq.(3.10) é similar àquela da Eq.(2.72), para a qual obtivemos o resultado da Eq.(2.75), após integração nos 4 diferentes caminhos da Fig.(2.3). Logo,

$$\langle xq | G_0^{(\pm)} | x'q' \rangle = \sum_{j=0}^{+\infty} \phi_j(q) \phi_j(q') \frac{m}{ik_j \hbar^2} e^{\pm ik_j |x-x'|}. \quad (3.13)$$

A solução (+), que corresponde às ondas espalhadas saindo do potencial, será

$$\begin{aligned} \varphi_J^{(+)}(x, q) &= \frac{1}{\sqrt{L}} e^{ik_J x} \phi_J(q) + \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_{j=0}^{+\infty} \phi_j(q) e^{ik_j |x|} \\ &\times \frac{mb}{\hbar^2} \frac{1}{ik_j} \left[\mu a_{J \rightarrow j} + \gamma \left(\sqrt{j+1} a_{J \rightarrow j+1} + \sqrt{j} a_{J \rightarrow j-1} \right) \right], \end{aligned} \quad (3.14)$$

em que o subíndice J indica o modo inicial do oscilador e definimos

$$a_{J \rightarrow j} \equiv \sqrt{L} \int_{-\infty}^{+\infty} dq' \varphi_J^{(+)}(0, q') \phi_j(q'). \quad (3.15)$$

Podemos tomar a Eq.(3.14) em $x = 0$ e fazer o produto escalar com $\sqrt{L} \phi_j(q')$, para obter uma relação de recorrência de 3 termos:

$$a_{J \rightarrow j} = \delta_{j,J} + \frac{mb}{\hbar^2} \frac{1}{ik_j} \left[\mu a_{J \rightarrow j} + \gamma \left(\sqrt{j+1} a_{J \rightarrow j+1} + \sqrt{j} a_{J \rightarrow j-1} \right) \right], \quad (3.16)$$

análoga à relação da Eq.(2.78). A diferença, aqui, reside na presença de amplitudes de estados distintos do oscilador harmônico, na mesma expressão. Substituindo o resultado da Eq.(3.16) na Eq.(3.14), chegamos aos auto-estados do espalhamento em $x < 0$:

$$\varphi_J^{(+)}(x, q) = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{ik_J x} \phi_J(q) + \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_{j=0}^{+\infty} e^{-ik_j x} \phi_j(q) [a_{J \rightarrow j} - \delta_{j,J}], \quad (3.17)$$

e em $x > 0$:

$$\varphi_J^{(+)}(x, q) = \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_{j=0}^{+\infty} a_{J \rightarrow j} e^{ik_j x} \phi_j(q). \quad (3.18)$$

Desta forma, identificamos $[a_{J \rightarrow j} - \delta_{j,J}]$ como a amplitude da onda refletida através do modo j , e $a_{J \rightarrow j}$ como a amplitude da onda transmitida.

3.2 Método Para o Cálculo das Amplitudes

O método para o cálculo das amplitudes, a partir da Eq.(3.16), envolverá a imposição de que estas amplitudes devem ir a zero para um valor de j suficientemente grande. Para compreender que isto é razoável fisicamente, tomemos como exemplo uma situação em que o oscilador harmônico esteja inicialmente estático (modo $J = 0$). Um elétron incidente com energia longitudinal $\varepsilon_x > \hbar\omega$ é capaz de excitá-lo, através da transferência de um ou mais quanta de energia, $\hbar\omega$. Isto cria diferentes canais de transmissão, com amplitudes $a_{0 \rightarrow j}(\varepsilon_x)$. Se este elétron passa pelo potencial sem excitar o oscilador, o espalhamento é elástico ($j = 0$). Veremos que a amplitude $a_{0 \rightarrow 0}$ e a sua equivalente para acoplamento nulo são diferentes, em geral. Isto é devido ao fato de o acoplamento tornar possível que os canais inelásticos ($J \rightarrow j \neq J$) afetem a amplitude $a_{0 \rightarrow 0}$. Agora, para um elétron que leva o oscilador ao primeiro modo de oscilação, sua energia após o espalhamento é $\varepsilon_x - \hbar\omega$ e sua amplitude é naturalmente menor. Para um elétron que perde um número maior de quanta para o oscilador harmônico, a amplitude é ainda menor e vai

a zero à medida que aumentamos j . Podemos analisar isto de um ponto de vista mais matemático, notando que a função $\phi_j(q')$ na Eq.(3.15) oscila muito em torno de 0, para j 's suficientemente grandes, praticamente anulando a contribuição de $\varphi_j^{(+)}(0, q')$.

Assim sendo, escreveremos a Eq.(3.16) de $j = 0$ até $j = M > J$, impondo $a_{J \rightarrow M+1} = 0$. O conjunto dessas equações formará um sistema linear de $M + 1$ equações e $M + 1$ incógnitas ($a_{J \rightarrow 0}, a_{J \rightarrow 1}, \dots, a_{J \rightarrow M}$) de forma tridiagonal:

$$\begin{pmatrix} \mu - \frac{\hbar^2}{mb}ik_0 & \gamma\sqrt{1} & & & 0 \\ \gamma\sqrt{1} & \mu - \frac{\hbar^2}{mb}ik_1 & \gamma\sqrt{2} & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & \gamma\sqrt{J} & \mu - \frac{\hbar^2}{mb}ik_J & \gamma\sqrt{J+1} \\ & & & \ddots & \ddots & \ddots \\ 0 & & & \gamma\sqrt{M} & \mu - \frac{\hbar^2}{mb}ik_M \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_{J \rightarrow 0} \\ a_{J \rightarrow 1} \\ \vdots \\ a_{J \rightarrow J} \\ \vdots \\ a_{J \rightarrow M} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ -\frac{\hbar^2}{mb}ik_J \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (3.19)$$

Agora, basta resolvermos tal sistema utilizando algum método conhecido, como o da eliminação Gaussiana⁴³, em que fazemos a combinação linear de linhas em pares até obtermos uma matriz triangular, do lado esquerdo da equação. Devemos repetir o processo para $M + 1$, fazendo dessa vez $a_{J \rightarrow M+2} = 0$, e comparar com os resultados obtidos anteriormente. O processo acaba quando se verifica a convergência das amplitudes, dentro de uma certa precisão.

3.3 Condição de Convergência

Mostraremos que o método para a obtenção das amplitudes nem sempre converge. Num primeiro momento, buscaremos uma forma intuitiva de demonstrar a condição de convergência, a qual relaciona γ e ω . Em seguida, confirmaremos o resultado através de um teorema matemático.

Reduziremos a relação de recorrência de 3 termos para apenas 2. Fazemos isso dividindo a Eq.(3.16) por $a_{J \rightarrow j-1}$ e definindo $R_j \equiv a_{J \rightarrow j}/a_{J \rightarrow j-1}$, de modo que

$$R_j = \frac{\gamma\sqrt{j}}{\frac{\hbar^2}{mb}ik_j - \mu - \gamma\sqrt{j+1}R_{j+1}}, \quad j > J. \quad (3.20)$$

Já discutimos o fato de que as amplitudes vão a zero à medida que aumentamos j . O decaimento será tão mais forte quanto mais intenso o acoplamento com o oscilador harmônico quântico. Intuitivamente, uma queda deste tipo é expresso por uma exponencial decrescente, em que a constante de decaimento ξ é função do acoplamento γ . Para $J \ll j \lesssim M$, é razoável supor $a_{J \ll j \lesssim M} \sim e^{-\xi j}$. Desta forma, a razão $R_{J \ll j \lesssim M}$ deve ser aproximadamente constante e igual a $e^{-\xi}$, para um dado γ . Então da Eq.(3.20), podemos escrever

$$R_{J \ll j \lesssim M} \approx \frac{\gamma \sqrt{j}}{\frac{\hbar^2}{mb} i k_j - \mu - \gamma \sqrt{j} + 1} R_{J \ll j \lesssim M} \quad (3.21)$$

$$= \frac{\gamma}{\frac{\hbar^2}{mb} i \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} \left(\frac{E}{j} - \hbar\omega \right) - \frac{\mu}{\sqrt{j}} - \gamma \sqrt{1 + \frac{1}{j}}} R_{J \ll j \lesssim M}}. \quad (3.22)$$

Fazendo o limite $j \rightarrow +\infty$, já que $j \gg J$, obtemos

$$R_{J \ll j \lesssim M} \approx \frac{\gamma}{\frac{\hbar^2}{mb} i \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (-\hbar\omega)} - \gamma R_{J \ll j \lesssim M}}, \quad (3.23)$$

que nos leva a uma equação de segundo grau na variável $R_{J \ll j \lesssim M}$:

$$\gamma R_{J \ll j \lesssim M}^2 + \frac{\hbar}{b} \sqrt{\frac{2\hbar\omega}{m}} R_{J \ll j \lesssim M} + \gamma \approx 0. \quad (3.24)$$

As duas soluções são, então,

$$R_{J \ll j \lesssim M}^{\pm} \approx \frac{-\frac{\hbar}{b} \sqrt{\frac{2\hbar\omega}{m}} \pm \sqrt{\frac{\hbar^2}{b^2} \frac{2\hbar\omega}{m} - 4\gamma^2}}{2\gamma}. \quad (3.25)$$

Agora, vamos impor a condição de que o módulo de $R_{J \ll j \lesssim M} \sim e^{-\xi}$ esteja entre 0 e 1. Para $\frac{\hbar^2}{b^2} \frac{2\hbar\omega}{m} - 4\gamma^2 < 0$, esta condição não é atendida por nenhuma das soluções. Já, para $\frac{\hbar^2}{b^2} \frac{2\hbar\omega}{m} - 4\gamma^2 \geq 0$, é atendida por $R_{J \ll j \lesssim M}^+$. Isso nos dá uma restrição para os valores de $b\gamma$ e $\hbar\omega$:

$$b\gamma \leq \sqrt{\hbar\omega \left(\frac{\hbar^2}{2m} \right)}. \quad (3.26)$$

Este resultado, como veremos a seguir, está em acordo com o teorema de Worpitzky⁴⁴:

Teorema de Worpitzky. “Se $|c_n| \leq 1/4$ para todo n , então $K(c_n|1)$ converge para algum valor em $\{z : |z| \leq 1/2\}$. ”

Este teorema se refere a uma fração contínua escrita na forma

$$K(c_n|b_n) = \frac{c_1}{b_1 + \frac{c_2}{b_2 + \frac{c_3}{\ddots}}}. \quad (3.27)$$

Da Eq.(3.20), podemos tirar a expressão para R_{j+1} em termos de R_{j+2} e substituí-la em R_j . Fazendo este procedimento indefinidamente, obtemos uma expressão para R_j na forma de fração contínua:

$$R_j = \frac{\gamma\sqrt{j}}{\frac{\hbar^2}{mb}ik_j - \mu - \frac{\gamma^2(j+1)}{\frac{\hbar^2}{mb}ik_j - \mu - \frac{\gamma^2(j+2)}{\frac{\hbar^2}{mb}ik_j - \mu - \dots}}} \quad (3.28)$$

$$= \frac{\gamma\sqrt{j}}{\frac{\hbar^2}{mb}ik_j - \mu} \left(\frac{1}{1 - \frac{\gamma^2(j+1)/(\frac{\hbar^2}{mb}ik_j - \mu)}{1 - \frac{\gamma^2(j+2)/(\frac{\hbar^2}{mb}ik_j - \mu)}{1 - \dots}}} \right) \quad (3.29)$$

$$= K(c_n|1), \quad (3.30)$$

com

$$c_1 = 1, \quad (3.31)$$

$$c_{n>1} = -\gamma^2(j+n)/\left(\frac{\hbar^2}{mb}ik_j - \mu\right) \quad \text{e} \quad (3.32)$$

$$b_n = 1. \quad (3.33)$$

Assim, do teorema de Worpitzky, escolhendo n igual à ordem de corte $M \gg J$ e $j = M-1$:

$$|c_M| \approx \left| \frac{-\gamma^2(1+M)/\left(\frac{\hbar^2}{mb}ik_1 - \mu\right)}{\left(\frac{\hbar^2}{mb}ik_1 - \mu\right)} \right| \leq \frac{1}{4}. \quad (3.34)$$

Então, fazendo $M \rightarrow +\infty$, chegamos à mesma condição da Eq.(3.26). Este teorema pode ser provado rigorosamente, segundo Beardon⁴⁴, e envolve um ferramental matemático que foge ao escopo do presente trabalho. Esta prova vai muito além de nossa suposição simplificada de decaimento exponencial das amplitudes, utilizando-se de argumentos geométricos.

A possibilidade de divergência, no contexto do potencial delta de Dirac, já foi reportada por Brandes e Robinson¹⁹. Foi observado que o truncamento do sistema na forma tridiagonal, Eq.(3.19), equivale a um método de perturbação. É uma regra geral

que esse tipo de método não seja válido para acoplamento forte, já que neste caso não é possível desprezar termos que carreguem ordens cada vez maiores do acoplamento. Desta forma, é natural que obtenhamos uma condição que relaciona os parâmetros $\hbar\omega$ e $b\gamma$, mesmo que γ seja determinado pelo material escolhido no experimento.

3.4 Potencial Repulsivo

Estudaremos as probabilidades de transmissão *versus* a energia de incidência do elétron ε_x para o potencial repulsivo ($\mu = |\mu|$). As probabilidades de transmissão e reflexão são calculadas a partir da razão das correntes de probabilidade transmitidas e refletidas sobre a corrente incidente, obtidas das Eq.(3.17) e (3.18):

$$T^{J \rightarrow j}(\varepsilon_x) = \frac{k_j(\varepsilon_x)}{k_J(\varepsilon_x)} |a_{J \rightarrow j}(\varepsilon_x)|^2 \quad (3.35)$$

e

$$R^{J \rightarrow j}(\varepsilon_x) = \frac{k_j(\varepsilon_x)}{k_J(\varepsilon_x)} |\delta_{j,J} - a_{J \rightarrow j}(\varepsilon_x)|^2. \quad (3.36)$$

Estamos supondo soluções propagantes, ou seja, que k_J e k_j sejam reais para os valores considerados de ε_x . No caso de soluções evanescentes (k_j imaginário puro), $T^{J \rightarrow j}$ e $R^{J \rightarrow j}$ dão naturalmente zero, pois a corrente espalhada é nula.

Analisaremos primeiramente o caso em que o elétron incidente vê o oscilador harmônico em seu modo de energia mais baixa, ou seja, $J = 0$. A curva tracejada da Fig.(3.1) corresponde à situação em que não há acoplamento entre o oscilador e o potencial delta de Dirac. Esta curva é simplesmente a probabilidade de transmissão $T_0^{0 \rightarrow 0}$ através do potencial delta de Dirac, como dado pela Eq.(2.81). A curva contínua em preto corresponde à transmissão elástica, $T^{0 \rightarrow 0}$, em que o oscilador harmônico é mantido no seu estado inicial. O acoplamento com o oscilador harmônico é responsável pelas discrepâncias entre $T_0^{0 \rightarrow 0}$ e $T^{0 \rightarrow 0}$. Isto pode ser compreendido da seguinte forma: a soma das probabilidades de transmissão e reflexão dos vários estados de espalhamento do problema deve somar 1, da mesma forma que no caso desacoplado, em que $T_0^{0 \rightarrow 0} + R_0^{0 \rightarrow 0} = 1$:

$$T^{0 \rightarrow 0}(\varepsilon_x) + \sum_{j \neq 0} T^{0 \rightarrow j}(\varepsilon_x) + R^{0 \rightarrow 0}(\varepsilon_x) + \sum_{j \neq 0} R^{0 \rightarrow j}(\varepsilon_x) = 1. \quad (3.37)$$

Para uma energia de incidência menor que aquela necessária para se levar o oscilador harmônico ao primeiro modo excitado, $T^{0 \rightarrow 0} + R^{0 \rightarrow 0} = 1$. Assim, quando ε_x cruza $\hbar\omega$, a expressão ganha novos termos, fazendo diminuir os valores de $T^{0 \rightarrow 0}$ e $R^{0 \rightarrow 0}$. Isso aparece

como uma queda súbita de $T^{0 \rightarrow 0}$, na Fig.(3.3). A partir dessa energia, a curva aparece sempre abaixo de $T_0^{0 \rightarrow 0}$, pois novos termos vão se somando a cada novo quantum de energia. Tais termos estão representados pela curva contínua em vermelho, $\sum_{j \neq 0} T^{0 \rightarrow j}$, a qual contribui para a soma da Eq.(3.37) apenas a partir de $\varepsilon_x = \hbar\omega$. Para $\varepsilon_x \gg \hbar\omega$, $T^{0 \rightarrow 0}$ se aproxima de $T_0^{0 \rightarrow 0}$, pois o elétron que se espalha através do canal elástico não sente mais a influência dos modos do oscilador no potencial quântico. Fisicamente, estamos observando uma mudança na escala de energia, quando a energia do oscilador é relativamente tão pequena que seu termo no Hamiltoniano pode ser desprezado.

Figura 3.1 – Probabilidade de transmissão através do potencial repulsivo *versus* a energia de incidência do elétron em unidades do parâmetro μ . Escolhemos o oscilador harmônico inicialmente no modo $J = 0$ e sua frequência de oscilação $\hbar\omega/\mu = 5$, além de $\tilde{b} = 1$. A curva tracejada corresponde ao caso em que não há acoplamento com o oscilador harmônico ($\gamma/\mu = 0$). As curvas contínuas correspondem ao caso acoplado ($\gamma/\mu = 0.5$), sendo aquela em preto a probabilidade de transmissão do espalhamento elástico e em vermelho a soma devido a espalhamentos inelásticos. O oscilador harmônico pode ser excitado ao seu primeiro modo a partir de $\varepsilon_x/\mu = \hbar\omega/\mu = 5$, que é quando a curva em vermelho deixa de ser nula.

Para se compreender porque $T^{0 \rightarrow 0}$ ultrapassa $T_0^{0 \rightarrow 0}$, antes mesmo de qualquer modo inelástico ser aberto, devemos analisar a interferência entre amplitudes que dá origem a $T^{0 \rightarrow 0}$, obtido da Eq.(3.16):

$$T^{J \rightarrow J} = T_0^{J \rightarrow J} \left| 1 + \left(\frac{\gamma \sqrt{J+1}}{ik_J \frac{\hbar^2}{mb}} \right) a_{J \rightarrow J+1} + \left(\frac{\gamma \sqrt{J}}{ik_J \frac{\hbar^2}{mb}} \right) a_{J \rightarrow J-1} \right|^2, \quad (3.38)$$

com

$$T_0^{J \rightarrow J} = \frac{k_J^2 \left(\frac{\hbar^2}{mb} \right)^2}{\left| ik_J \frac{\hbar^2}{mb} - \mu \right|^2}. \quad (3.39)$$

No caso considerado, em que $J = 0$, vemos que a amplitude $a_{0 \rightarrow 1}$ contribui para $T^{0 \rightarrow 0}$ independente de seu modo correspondente ser evanescente ou propagante. Tal amplitude interfere construtivamente logo abaixo de $\varepsilon_x = \hbar\omega$, elevando o valor de $T^{0 \rightarrow 0}$ e formando o “bico” que vemos na Fig.(3.3), em torno de $\varepsilon_x/\mu = 5$.

Figura 3.2 – Probabilidade de transmissão através do potencial repulsivo *versus* a energia de incidência do elétron em unidades do parâmetro μ . Escolhemos o oscilador harmônico inicialmente no modo $J = 1$ e sua frequência de oscilação $\hbar\omega/\mu = 5$, além de $\tilde{b} = 1$. A curva tracejada corresponde ao caso em que não há acoplamento com o oscilador harmônico ($\gamma/\mu = 0$). As curvas contínuas correspondem ao caso acoplado ($\gamma/\mu = 0.5$), sendo aquela em preto a probabilidade de transmissão do espalhamento elástico e em vermelho a soma devido a espalhamentos inelásticos. O oscilador harmônico é capaz de receber um quantum de energia a partir de $\varepsilon_x/\mu = \hbar\omega/\mu = 5$, sendo excitado ao modo $j = 2$.

No caso de o oscilador harmônico estar inicialmente em um estado excitado, digamos $J = 1$, como considerado na Fig.(3.2), a Eq.(3.38) incluirá duas amplitudes na interferência. A análise é completamente análoga com relação a $J = 0$: a interferência construtiva leva ao aparecimento de um “bico” logo antes da energia de abertura do próximo modo. Antes do aparecimento do “bico”, temos que $T^{1 \rightarrow 1}$ está acima de $T_0^{1 \rightarrow 1}$, como tínhamos anteriormente para $J = 0$; porém neste caso ($J = 1$) a discrepância é menor. Isto ocorre, pois existem estados de espalhamento inelástico abaixo de $\varepsilon_x = \hbar\omega$, correspondentes à doação de um ou mais quanta de energia pelo oscilador harmônico. Assim, a curva contínua em vermelho, que inclui todos os modos inelásticos abertos, contribui para a soma da Eq.(3.37) (equação da conservação de probabilidade) a partir de $\varepsilon_x = 0$.

A queda abrupta, após $\varepsilon_x = \hbar\omega$, acontece devido à inclusão de novos termos, na mesma equação. Um segundo “bico” pode ser visualizado em torno de $\varepsilon_x = 2\hbar\omega$, quando há a abertura do próximo modo ($1 \rightarrow 3$).

3.5 Potencial Atrativo e Processos Virtuais

Agora, trataremos do potencial atrativo ($\mu = -|\mu|$). As probabilidades de transmissão e reflexão continuam definidas da mesma forma, a partir das Eq.(3.35) e (3.36). No entanto, veremos que as soluções para as amplitudes alteram drasticamente o perfil das curvas, através do aparecimento de estados quasi-estacionários. Estes estados geram ressonâncias assimétricas, chamadas de ressonâncias de Fano²⁵.

Na Fig.(3.3), em que $J = 0$, vemos nitidamente uma ressonância ocorrendo antes da abertura do canal $0 \rightarrow 1$ (antes de $\varepsilon_x = \hbar\omega$), para a probabilidade de transmissão elástica, $T^{0 \rightarrow 0}$. Esta ressonância é altamente assimétrica, indo a 0 e logo em seguida a 1, que é o máximo valor que a probabilidade de transmissão pode assumir. Outra ressonância, de menor intensidade, aparece na curva da soma das probabilidades de transmissão inelásticas, em vermelho, antes da abertura do canal $0 \rightarrow 2$ (antes de $\varepsilon_x = 2\hbar\omega$). Devido à conservação de probabilidade, dada pela Eq.(3.37), esta ressonância é refletida na curva de $T^{0 \rightarrow 0}$. A seguir, explicaremos a forma dessas ressonâncias, a partir da interferência de amplitudes dada pela Eq.(3.38). Provaremos que a amplitude $a_{0 \rightarrow 1}$ pode ser escrita na forma de Breit-Wigner e que como consequência, a probabilidade de transmissão elástica possui um perfil de ressonância de Fano.

Para $J = 0$, a Eq.(3.38) se torna

$$T^{0 \rightarrow 0} = T_0^{0 \rightarrow 0} \left| 1 + \frac{\gamma}{ik_0 \frac{\hbar^2}{mb}} a_{0 \rightarrow 1} \right|^2, \quad T_0^{0 \rightarrow 0} \equiv \frac{k_0^2 \left(\frac{\hbar^2}{mb} \right)^2}{\left| ik_0 \frac{\hbar^2}{mb} - \mu \right|^2}. \quad (3.40)$$

Se $\gamma = 0$, então $T^{0 \rightarrow 0} = T_0^{0 \rightarrow 0}$ e as ressonâncias desaparecem do problema (curva tracejada da Fig.(3.3)). Logo, o acoplamento do potencial delta de Dirac com o oscilador harmônico é essencial para o aparecimento de estados quasi-estacionários. Podemos compreender isto através do diagrama da Fig.(3.4). No caso em que a energia de incidência do elétron coincide com a energia de estado ligado,

$$E_{\text{bound}} = -\frac{m}{2\hbar^2} (b\mu)^2, \quad (3.41)$$

Figura 3.3 – Versão atrativa ($\mu = -|\mu|$) da Fig.(3.1), com $J = 0$, $\tilde{b} = 1$ e $\hbar\omega/|\mu| = 5$. $\gamma/|\mu| = 0$, para a curva tracejada, e 0.5 para as curvas contínuas. Note que a ressonância de $T^{0 \rightarrow 0}$ ocorre abaixo do primeiro quantum de energia.

mais um quantum de energia do oscilador, $\hbar\omega$; existe a possibilidade desse elétron doar um quantum para o oscilador harmônico, em um processo virtual, caindo para o nível discreto logo abaixo, E_{bound} . Neste diagrama, os níveis de energia são correspondentes ao caso desacoplado. Como veremos, no caso em que há acoplamento a energia dos níveis discretos não é simplesmente a soma de E_{bound} com níveis do oscilador harmônico. Além disso os níveis discretos, em interferência com o espectro contínuo, adquirem uma largura correspondente à largura da ressonância. Embora o tempo não entre diretamente nesta abordagem, interpretamos que esta largura possui uma relação de incerteza com o tempo de interação. Este tempo deve ser longo, porém finito, já que o estado é de espalhamento e não um estado estacionário real; por isso o nome “estado quasi-estacionário”.

Para encontrarmos uma expressão para $a_{0 \rightarrow 1}$, partimos da relação de recorrência de 3 termos para as amplitudes, Eq.(3.16). Escrevemos esta relação para $j = 0, 1$ e 2; supondo que $a_{0 \rightarrow 3} = 0$, ou seja, que as amplitudes caiam rapidamente com j . Resolvendo o sistema de 3 equações, nas variáveis $a_{0 \rightarrow 0}$, $a_{0 \rightarrow 1}$ e $a_{0 \rightarrow 2}$, obtemos

$$a_{0 \rightarrow 1} = \frac{\gamma \frac{\hbar^2}{mb} i k_0}{\left(-\mu + \frac{\hbar^2}{mb} i k_1 - \frac{2\gamma^2}{-\mu + \frac{\hbar^2}{mb} i k_2} \right) \left(-\mu + \frac{\hbar^2}{mb} i k_0 \right) - \gamma^2}. \quad (3.42)$$

Desejamos provar que a amplitude $a_{0 \rightarrow 1}$ pode ser escrita na forma de Breit-Wigner:

$$a_{0 \rightarrow 1} = \frac{A}{(\varepsilon_x - \varepsilon_r) + i \frac{\Gamma}{2}}. \quad (3.43)$$

Figura 3.4 – Diagrama da energia total, para o oscilador harmônico inicialmente em $J = 0$. Estamos ignorando o acoplamento entre o potencial delta de Dirac e a coordenada harmônica. O elétron incidente pode ter qualquer energia dentre aquelas do espectro contínuo, ilustrado em cinza. O potencial delta possui apenas uma única energia de estado ligado, E_{bound} , a partir da qual construímos o espectro discreto do lado direito. Quando a energia de incidência do elétron coincide com $E_{\text{bound}} + \hbar\omega$, o que representamos pela linha azul, há a possibilidade de uma transição virtual. O elétron pode cair para o nível E_{bound} , através da doação de um quantum de energia para o oscilador harmônico. Esta transição está relacionada com a interferência com a amplitude $a_{0 \rightarrow 1}$, que aparece na Eq.(3.40), antes de se atingir a energia mínima $\hbar\omega$ para a abertura do modo $0 \rightarrow 1$. Este processo virtual é ressonante e altera drasticamente a forma das curvas da probabilidade de transmissão *versus* a energia de incidência do elétron, em relação ao caso do potencial repulsivo.

Iniciamos supondo que para alguma energia ε'_1 , em princípio diferente de $\varepsilon_1 = E_{\text{bound}} + \hbar\omega$,

$$-\mu + \frac{\hbar^2}{mb} i k_1(\varepsilon'_1) - \frac{2\gamma^2}{-\mu + \frac{\hbar^2}{mb} i k_2(\varepsilon'_1)} = 0. \quad (3.44)$$

ε'_1 pode ser encontrado trocando ε'_1 por ε_1 no terceiro termo do lado esquerdo da Eq.(3.44) e resolvendo a equação resultante na variável ε'_1 . A justificativa para tal procedimento reside no fato de este termo ser quadrático em γ . Qualquer correção a este termo deve ser de ordem maior que γ^2 , o que estamos desprezando. Assim, obtemos

$$\varepsilon'_1 \approx \hbar\omega - \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{mb}{\hbar^2} \right)^2 \left[-\mu + \frac{2\gamma^2}{\mu + \frac{\hbar^2}{mb} \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} \left(\frac{m(b\mu)^2}{2\hbar^2} + \hbar\omega \right)}} \right]^2, \quad (3.45)$$

que pode ser reescrita em termos de ε_1 como

$$\varepsilon'_1 \approx \varepsilon_1 + \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{mb}{\hbar^2} \right)^2 \frac{4\mu\gamma^2}{\mu + \frac{\hbar^2}{mb} \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} \left(\frac{m(b\mu)^2}{2\hbar^2} + \hbar\omega \right)}} + O(\gamma^4). \quad (3.46)$$

Note que só mantivemos termos até segunda ordem em γ , por questões de coerência

com a aproximação feita inicialmente. Na ausência de acoplamento, teríamos $\varepsilon'_1 = \varepsilon_1$ e não haveria ressonância alguma (curva tracejada da Fig.(3.3)). Agora que temos uma aproximação para o lado esquerdo da Eq.(3.44), podemos expandi-lo em torno de ε'_1 :

$$-\mu - \frac{\hbar^2}{mb}ik_1 - \frac{2\gamma^2}{-\mu - \frac{\hbar^2}{mb}ik_2} \approx \alpha(\varepsilon'_1)(\varepsilon_x - \varepsilon'_1), \quad (3.47)$$

em que $\alpha(\varepsilon'_1)$ é o coeficiente do termo linear da série de Taylor:

$$\alpha(\varepsilon'_1) = \left. \frac{d}{d\varepsilon_x} \left[\frac{\hbar^2}{mb}ik_1 - \frac{2\gamma^2}{\frac{\hbar^2}{mb}ik_2 - \mu} \right] \right|_{\varepsilon_x = \varepsilon'_1} \quad (3.48)$$

$$= \left(\frac{\hbar^2}{mb} \right)^2 \frac{2m}{\hbar^2} \frac{1}{2|\mu|} + O(\gamma^2). \quad (3.49)$$

Faremos as seguintes definições adicionais

$$A \equiv \frac{\gamma c_0}{\left(\frac{\hbar^2}{mb}ik_0 - \mu \right) \alpha(\varepsilon'_1)}, \quad (3.50)$$

$$\varepsilon_r \equiv \varepsilon'_1 - \frac{\mu \gamma^2}{\left[\mu^2 + \left(\frac{\hbar^2}{mb}k_0 \right)^2 \right] \alpha(\varepsilon'_1)} \quad (3.51)$$

e

$$\Gamma \equiv \frac{2 \frac{\hbar^2}{mb}k_0 \gamma^2}{\left[\mu^2 + \left(\frac{\hbar^2}{mb}k_0 \right)^2 \right] \alpha(\varepsilon'_1)}, \quad (3.52)$$

para finalmente escrever $a_{0 \rightarrow 1}$ na forma de Breit-Wigner, Eq.(3.43). Quando $\varepsilon_x = \varepsilon_r$, $a_{0 \rightarrow 1}$ muda de sinal, o que equivale a uma mudança da fase de π . Esta mudança de fase pode levar a interferência da Eq.(3.40) a mudar de destrutiva para construtiva. Isto é o que dá origem ao perfil assimétrico da ressonância de Fano presente em $T^{0 \rightarrow 0}$, o qual ocorre abaixo do primeiro quantum de energia. As Eq.(3.46) e (3.51) nos mostram que $\varepsilon_r \neq \hbar\omega$ e, como $\varepsilon_1 = E_{\text{bound}} + \hbar\omega < \hbar\omega$, é possível termos $\varepsilon_r < \hbar\omega$. Devido ao princípio de incerteza entre energia e tempo ($\Delta E \Delta t \sim \hbar$), o tempo de interação entre o elétron e o potencial quântico é da ordem de $\hbar/\Gamma$. Assim, se o acoplamento é muito fraco ($\gamma \approx 0$), então $\Gamma \approx 0$ e o tempo de interação é bastante longo, porém finito (o elétron não está realmente ligado, pois trata-se de um processo de espalhamento). Das Eq.(3.40) e (3.43), podemos escrever $T^{0 \rightarrow 0}/T_0^{0 \rightarrow 0}$ como um perfil de ressonância de Fano:

$$\frac{T^{0 \rightarrow 0}}{T_0^{0 \rightarrow 0}} = \frac{(\epsilon + q)^2}{\epsilon^2 + 1}, \quad (3.53)$$

com energia reduzida

$$\epsilon \equiv \frac{2(\epsilon_x - \epsilon_r)}{\Gamma} \quad (3.54)$$

e parâmetro de assimetria

$$q \equiv \frac{mb}{\hbar^2} \frac{|\mu|}{k_0}. \quad (3.55)$$

Note que ambos parâmetros dependem de $k_0 = k_0(\epsilon_x)$. No entanto, podemos fazer a aproximação $k_0 \approx k_0(\epsilon_1)$ nos termos carregando γ^2 , nas Eq.(3.51) e (3.52), de modo que $\epsilon_r \approx \epsilon_r(\epsilon_1)$ e $\Gamma \approx \Gamma(\epsilon_1)$, logo $\epsilon \approx \epsilon(\epsilon_1)$. Em princípio, não podemos fazer aproximação semelhante para o parâmetro de assimetria, pois seu valor altera drasticamente o perfil da ressonância, mesmo longe de ϵ_r . Por exemplo, para $|q| \rightarrow +\infty$, teríamos o perfil de uma Lorentziana com máximo em ϵ_r . Já para $q = 1$, teríamos uma ressonância de Fano perfeitamente assimétrica com relação a ϵ_r .²⁵ O máximo que podemos fazer é nos limitar à região compreendida pela largura da ressonância, digamos $\epsilon_x \in [\epsilon_r - \Gamma/2, \epsilon_r + \Gamma/2]$, com $\epsilon_r \approx \epsilon_r(\epsilon_1)$. Assim, $k_0 \approx k_0(\epsilon_r)$ na Eq.(3.55), de modo que $q \approx q(\epsilon_r)$ nesta região.

Figura 3.5 – Versão atrativa ($\mu = -|\mu|$) da Fig.(3.2), com $J = 1$, $\tilde{b} = 1$ e $\hbar\omega/|\mu| = 5$. $\gamma/|\mu| = 0$, para a curva tracejada, e 0.5 para as curvas contínuas. A ressonância de $T^{1 \to 1}$ ocorre abaixo de $\hbar\omega/|\mu|$.

Para $J = 1$, também verificamos a presença de ressonâncias altamente assimétricas, através da Fig.(3.5). Neste caso, a interferência presente na Eq.(3.38) inclui 2 amplitudes distintas:

$$T^{1 \to 1} = T_0^{1 \to 1} \left| 1 + \frac{\gamma\sqrt{2}}{ik_1 \frac{\hbar^2}{mb}} a_{1 \to 2} + \frac{\gamma}{ik_1 \frac{\hbar^2}{mb}} a_{1 \to 0} \right|^2, \quad T_0^{1 \to 1} \equiv \frac{k_1^2 \left(\frac{\hbar^2}{mb} \right)^2}{\left| ik_1 \frac{\hbar^2}{mb} - \mu \right|^2}. \quad (3.56)$$

Estas amplitudes correspondem aos processos ilustrados na Fig.(3.6), em que o elétron

pode doar ou receber um quantum de energia. Quando a energia de incidência é ressonante com o nível discreto $E_{\text{bound}} + 2\hbar\omega$, esses processos levam a níveis vizinhos, abaixo e acima do nível original. Segundo os cálculos apresentados no apêndice, isto leva a um perfil de ressonância que apresenta uma componente assimétrica (ressonância de Fano com $q \neq 0$) em adição a uma componente simétrica (ressonância de Fano com $q = p \gg \epsilon$):

$$\frac{T^{1 \rightarrow 1}}{T_0^{1 \rightarrow 1}} \propto \frac{(\epsilon + q)^2}{\epsilon^2 + 1} + \frac{p^2}{\epsilon^2 + 1}. \quad (3.57)$$

A doação pelo elétron de um quantum é um processo virtual, pois o nível $E_{\text{bound}} + \hbar\omega$ está abaixo do fundo do espectro contínuo de energias de incidência do elétron. Portanto, a amplitude $a_{1 \rightarrow 2}$ será responsável pelo aparecimento da componente assimétrica. Já o recebimento de um quantum é um processo real, de modo que a amplitude $a_{1 \rightarrow 0}$ será responsável pela componente simétrica.

Figura 3.6 – Diagrama semelhante àquele da Fig.(3.4), porém com $J = 1$. Aqui, o espectro contínuo começa em $\hbar\omega$, pois abaixo disso o modo incidente é evanescente. Quando a energia total inicial, $E_{\text{inicial}} = \epsilon_x + \hbar\omega$, coincide com $E_{\text{bound}} + 2\hbar\omega$, o que representamos pela linha azul, há 2 possibilidades de transição imediatas. O elétron pode cair para o nível $E_{\text{bound}} + \hbar\omega$, através da doação de um quantum de energia para o oscilador harmônico. Esta transição esta relacionada com a interferência com a amplitude $a_{1 \rightarrow 2}$, que aparece na Eq.(3.56). Outra transição é aquela em que o elétron incidente recebe um quantum do oscilador harmônico, subindo para o nível $E_{\text{bound}} + 3\hbar\omega$. A amplitude correspondente é a $a_{1 \rightarrow 0}$, que também aparece interferindo na Eq.(3.56).

No próximo capítulo, Cap.(4), procuraremos um método para o cálculo da corrente elétrica através de potenciais quânticos que permitam que o elétron incidente ganhe ou perca energia para os mesmos. Adaptaremos o formalismo de Landauer para estes casos, porém sem levar em conta a competição entre canais elásticos e inelásticos, devido ao princípio de exclusão de Pauli. Prosseguiremos com o estudo de um método auto-consistente, exposto no artigo de Emberly e Kirczenow²², que contabiliza tal competição corretamente.

CAPÍTULO 4

Cálculo da Corrente Elétrica no Caso de Espalhamento Inelástico

Este capítulo trata do cálculo da corrente elétrica em sistemas para os quais o espalhamento é inelástico do ponto de vista do elétron. O sistema descrito no Capítulo 3 é um exemplo: o elétron pode trocar energia com um oscilador harmônico acoplado ao potencial delta de Dirac. A energia total do elétron pode ser alterada durante o espalhamento, mas a energia total do sistema (elétron mais oscilador harmônico) se mantém constante. Estamos utilizando a seguinte nomenclatura:

- **espalhamento elástico:** o elétron não muda sua energia e a energia total é conservada;
- **espalhamento inelástico:** o elétron perde ou ganha energia no espalhamento, mas a energia total é conservada;
- **espalhamento inelástico real:** o elétron perde ou ganha energia no espalhamento e a energia total não é conservada (troca de energia com o ambiente).

Primeiro, mostraremos uma tentativa de adaptação do formalismo de Landauer, descrita no Capítulo 2. Esta adaptação consiste basicamente em se considerar um número maior de canais de propagação, devido aos modos inelásticos. No caso deste trabalho, estes modos correspondem aos modos do oscilador harmônico acoplado ao potencial delta de Dirac. O conjunto de todos os modos (modos transversais mais modos do oscilador harmônico) continuará sendo ortogonal, pois as auto-funções do oscilador também o são.

Por último, estudaremos o procedimento correto para se calcular a corrente elétrica, em que consideraremos coincidências entre as energias dos canais de propagação. Este procedimento foi exposto primeiramente no artigo de Emberly e Kirczenow²², em que os autores se preocupam com o cálculo da corrente elétrica através de uma única molécula diatômica. Em nossa primeira tentativa de adaptação do formalismo de Landauer, tais coincidências ocorrem, porém não se considera que haja competição entre diferentes canais. É importante ressaltar que o problema continua sendo de um só elétron, sendo que o princípio de exclusão de Pauli age evitando coincidências de estados. Porém, é um problema de muitos corpos, no sentido de que consideramos um elétron interagindo com vários estados de fônons, associados às vibrações do potencial. Diremos que o problema é de não-equilíbrio, pois as distribuições associadas a cada estado de espalhamento dependerão de todas as outras que possam coincidir em energia. Desta forma o problema deverá ser resolvido auto-consistentemente.

A razão para se expor, num primeiro momento, nossa tentativa de adaptação do formalismo de Landauer é a de que posteriormente faremos a comparação entre resultados. Assim, pretendemos compreender melhor a relevância da contabilização correta de canais inelásticos no problema. Esperamos, por exemplo, que os 2 métodos coincidam no caso de acoplamento praticamente nulo.

4.1 Formalismo de Landauer - Adaptação para o Espalhamento Inelástico

Nesta seção, seguiremos passos semelhantes àqueles percorridos na Seq.(2.2), porém aqui levaremos em conta os índices dos modos harmônicos. Abandonaremos a notação da matriz de espalhamento, para escrever explicitamente as amplitudes que aparecem nas Eq.(3.17) e (3.18). Incluiremos os modos transversais devido à geometria do sistema (confinamento em y e z), representados por $\chi_n(z, y)$. A função de onda do lado esquerdo

($x < 0$) devido a elétrons vindos do reservatório esquerdo (L) será dada por

$$\psi_L(x \leq 0, y, z, q; E) = \psi_1 + \psi_2, \quad (4.1)$$

com

$$\psi_1 \equiv \sum_{n=1}^{M(E)} \chi_n(z, y) \frac{e^{ik_{n,J}^L(E)x}}{\sqrt{k_{n,J}^L(E)\hbar/m}} \phi_J(q), \quad (4.2)$$

$$\psi_2 \equiv \sum_{n=1}^{M(E)} \chi_n(z, y) \frac{1}{\sqrt{k_{n,J}^L(E)\hbar/m}} \sum_{j=0}^{N(E)} e^{-ik_{n,j}^L(E)x} \phi_j(q) [a_{J \rightarrow j}(E) - \delta_{j,J}]; \quad (4.3)$$

e sua versão temporalmente reversa, que corresponde a elétrons vindos do reservatório direito (R):

$$\begin{aligned} \psi_R(x \leq 0, y, z, q; E) &= \sum_{n=1}^{M(E)} \chi_n(z, y) \frac{1}{\sqrt{k_{n,J}^R(E)\hbar/m}} \sum_{j=0}^{N(E)} a'_{J \rightarrow j}(E) e^{-ik_{n,j}^L(E)x} \phi_j(q) \\ &\equiv \psi_3. \end{aligned} \quad (4.4)$$

Os fatores carregando números de onda, da forma $\frac{1}{\sqrt{k\hbar/m}}$, são justificados por facilitarem a conexão entre as correntes de probabilidade e as probabilidades de transmissão e reflexão, mais à frente. Estamos limitando as somas de acordo com o número máximo de modos abertos para a energia considerada, tanto em j quanto em n . Note que, em princípio, $a_{J \rightarrow j}(E) \neq a'_{J \rightarrow j}(E)$, se o potencial que descreve a amostra é assimétrico, como na Fig.(2.2). Definiremos as densidades de corrente de probabilidade como $\mathcal{J}_i \equiv \frac{\hbar}{2im} [\psi_i^* \partial \psi_i - \partial \psi_i^* \psi_i]$, com ψ_1 , ψ_2 and ψ_3 definidos respectivamente pelas Eq.(4.2), (4.3) e (4.4). A densidade total de corrente de probabilidade, do lado esquerdo, para ondas originárias do reservatório esquerdo é dada por

$$\mathcal{J}_{(\text{res.}L)} = \frac{\hbar}{2im} [(\psi_1^* + \psi_2^*) (\partial \psi_1 + \partial \psi_2) - (\partial \psi_1^* + \partial \psi_2^*) (\psi_1 + \psi_2)] \quad (4.5)$$

$$= \mathcal{J}_1 + \mathcal{J}_2 + \frac{\hbar}{2im} [\psi_1^* \partial \psi_2 + \psi_2^* \partial \psi_1 - \partial \psi_1^* \psi_2 - \partial \psi_2^* \psi_1]. \quad (4.6)$$

As derivadas parciais em x resultam em

$$\partial \psi_1 = ik_{n,J}^L(\psi_1)_n, \quad \partial \psi_1^* = -ik_{n,J}^L(\psi_1)_n^*, \quad (4.7)$$

$$\partial \psi_2 = -ik_{n,j}^L(\psi_2)_{n,j} \quad \text{e} \quad \partial \psi_2^* = ik_{n,j}^L(\psi_2)_{n,j}^*, \quad (4.8)$$

em que utilizamos a notação de Einstein ($u_j v_j \equiv \sum_j u_j v_j$) para abreviar as expressões. Definimos a componente $(\psi_1)_n$ de ψ_1 como

$$(\psi_1)_n \equiv \chi_n(z, y) \frac{e^{ik_{n,J}^L(E)x}}{\sqrt{k_{n,J}^L(E)\hbar/m}} \phi_J(q) \quad (4.9)$$

e a componente $(\psi_2)_{n,j}$ de ψ_2 como

$$(\psi_2)_{n,j} = \chi_n(z, y) \frac{1}{\sqrt{k_{n,J}^L(E)\hbar/m}} e^{-ik_{n,j}^L(E)x} \phi_j(q) [a_{J \rightarrow j}(E) - \delta_{j,J}]. \quad (4.10)$$

Logo,

$$\mathcal{J}_{(\text{res.}L)} = \mathcal{J}_1 + \mathcal{J}_2 - ik_{n,j}^L \psi_1^* (\psi_2)_{n,j} + ik_{n,J}^L \psi_2^* (\psi_1)_n + ik_{n,J}^L (\psi_1)_n^* \psi_2 - ik_{n,j}^L (\psi_2^*)_{n,j} \psi_1 \quad (4.11)$$

Usando a relação de completeza para os estados do oscilador harmônico quântico,

$$\int dq \phi_{j'}(q) \phi_j(q) = \delta_{j',j} \quad (4.12)$$

e dos modos transversais, Eq.(2.20), podemos mostrar as seguintes relações:

$$\int dydzdq [-ik_{n,j}^L \psi_1^* (\psi_2)_{n,j}] = \int dydzdq [-ik_{n,J}^L (\psi_1)_n^* (\psi_2)_{n,J}], \quad (4.13)$$

$$\int dydzdq [ik_{n,J}^L \psi_2^* (\psi_1)_n] = \int dydzdq [ik_{n,J}^L (\psi_2^*)_{n,J} (\psi_1)_n], \quad (4.14)$$

$$\int dydzdq [ik_{n,J}^L (\psi_1)_n^* \psi_2] = \int dydzdq [ik_{n,J}^L (\psi_1)_n^* (\psi_2)_{n,J}] \quad (4.15)$$

e

$$\int dydzdq [ik_{n,j}^L (\psi_2^*)_{n,j} \psi_1] = \int dydzdq [ik_{n,J}^L (\psi_2^*)_{n,J} (\psi_1)_n]. \quad (4.16)$$

Note que, na notação de Einstein, J não é um índice a ser somado, já que é um valor específico do índice variável j . Portanto, definindo a corrente de probabilidade como

$$\mathcal{I} \equiv \frac{\hbar}{2im} \int dydzdq \mathcal{J}, \quad (4.17)$$

obtemos

$$\mathcal{I}_{(\text{res.}L)} = \int dydzdq \mathcal{J}_{(\text{res.}L)} = \mathcal{I}_1 + \mathcal{I}_2. \quad (4.18)$$

Este resultado é uma manifestação do fato de que estados fermiônicos temporalmente reversos são ortogonais, ou seja, ambos são auto-estados da mesma energia (teorema de

Kramers)³⁸. Seguindo a mesma notação,

$$\mathcal{I}_{(\text{res.}R)} = \mathcal{I}_3. \quad (4.19)$$

$\mathcal{I}_1$ é obtido de

$$\begin{aligned} \mathcal{I}_1(E) &= \frac{\hbar}{2im} \int dy dz dq \mathcal{I}_1 \\ &= \frac{\hbar}{2im} \int dy dz dq \\ &\times \left\{ \sum_{n=1}^{M(E)} \chi_n^*(z, y) \frac{e^{-ik_{n,J}^L(E)x}}{\sqrt{k_{n,J}^L(E)\hbar/m}} \phi_J^*(q) \right. \\ &\quad \times \sum_{n'=1}^{M(E)} \chi_{n'}(z, y) i k_{n',J}^L(E) \frac{e^{ik_{n',J}^L(E)x}}{\sqrt{k_{n',J}^L(E)\hbar/m}} \phi_J(q) \\ &\quad - \sum_{n=1}^{M(E)} \chi_n^*(z, y) [-ik_{n,J}^L(E)] \frac{e^{-ik_{n,J}^L(E)x}}{\sqrt{k_{n,J}^L(E)\hbar/m}} \phi_J^*(q) \\ &\quad \left. \times \sum_{n'=1}^{M(E)} \chi_{n'}(z, y) \frac{e^{ik_{n',J}^L(E)x}}{\sqrt{k_{n',J}^L(E)\hbar/m}} \phi_J(q) \right\}. \end{aligned} \quad (4.20)$$

Da relação de completeza, Eq.(2.20),

$$\mathcal{I}_1(E) = M(E). \quad (4.21)$$

Similarmente,

$$\mathcal{I}_2(E) = - \sum_{n=1}^{M(E)} \sum_{j=0}^{N(E)} \frac{k_{n,j}^L(E)}{k_{n,J}^L(E)} |a_{J \rightarrow j}(E) - \delta_{j,J}|^2 \quad (4.22)$$

e

$$\mathcal{I}_3(E) = - \sum_{n=1}^{M(E)} \sum_{j=0}^{N(E)} \frac{k_{n,j}^L(E)}{k_{n,J}^R(E)} |a'_{J \rightarrow j}(E)|^2. \quad (4.23)$$

As distribuições de elétrons dentro dos reservatórios devem ser funções somente da energia de incidência em x , ε_x , mais aquela na direção transversal (plano yz), ϵ_n . Em outras palavras, estas distribuições devem depender da energia total subtraída da energia inicial do oscilador harmônico: $E - J\hbar\omega$. Os números de onda podem ser reescritos em função

de ε_x :

$$k_{n,j}^L(E) = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} \left(E - j\hbar\omega - \epsilon_n - \frac{eV}{2} \right)} \quad (4.25)$$

$$= \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} \left[\varepsilon_x - \Delta j\hbar\omega - \frac{eV}{2} \right]} \quad (4.26)$$

$$\equiv k_{J-j}^L(\varepsilon_x, V), \quad (4.27)$$

com $\Delta j \equiv j - J$, e

$$k_{n,j}^R(E) = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} \left(E - j\hbar\omega - \epsilon_n + \frac{eV}{2} \right)} \quad (4.28)$$

$$= \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} \left[\varepsilon_x - \Delta j\hbar\omega + \frac{eV}{2} \right]} \quad (4.29)$$

$$\equiv k_{J-j}^R(\varepsilon_x, V). \quad (4.30)$$

Seguindo esta notação, $k_{n,J}^\alpha(E) = k_0^\alpha(\varepsilon_x, V)$. A densidade de elétrons será dada por

$$\rho_L = \frac{1}{L_x} \sum_{k \in \mathbb{R}} \{ [\mathcal{I}_1(\varepsilon_x, V) + \mathcal{I}_2(\varepsilon_x)] F(\varepsilon_x - \mu_L) + \mathcal{I}_3(\varepsilon_x, V) F(\varepsilon_x - \mu_R) \}, \quad (4.31)$$

em que já estamos considerando que só o primeiro modo transversal é acessível ($\epsilon_2 \rightarrow +\infty$, $\epsilon_2 < \epsilon_3 < \epsilon_4 < \dots$) e que $\epsilon_1 = 0$. Estamos representando a função de Fermi como na Eq.(2.29). A corrente elétrica, $I = \rho_L ev$, do lado esquerdo e para um modo harmônico inicial J , será

$$\begin{aligned} I_J = & \frac{e}{2\pi\hbar} \int_{\frac{eV}{2}}^{+\infty} d\varepsilon_x \left[\left(1 - \sum_{j=0}^{N(\varepsilon_x)} \frac{k_{J-j}^L(\varepsilon_x, V)}{k_0^L(\varepsilon_x, V)} |a_{J \rightarrow j}(\varepsilon_x, V) - \delta_{j,J}|^2 \right) F(\varepsilon_x - \mu_L) \right. \\ & \left. - \sum_{j=0}^{N(\varepsilon_x)} \frac{k_{J-j}^L(\varepsilon_x, V)}{k_0^R(\varepsilon_x, V)} |a'_{J \rightarrow j}(\varepsilon_x, V)|^2 F(\varepsilon_x - \mu_R) \right]. \end{aligned} \quad (4.32)$$

Podemos simplificar esta expressão utilizando a conservação de probabilidade:

$$\sum_{j=0}^{N(\varepsilon_x)} \frac{k_{J-j}^R(\varepsilon_x, V)}{k_0^L(\varepsilon_x, V)} |a_{J \rightarrow j}(\varepsilon_x, V)|^2 + \sum_{j=0}^{N(\varepsilon_x)} \frac{k_{J-j}^L(\varepsilon_x, V)}{k_0^L(\varepsilon_x, V)} |a_{J \rightarrow j}(\varepsilon_x, V) - \delta_{j,J}|^2 = 1. \quad (4.33)$$

Logo,

$$I_J = \frac{e}{2\pi\hbar} \int_{\frac{eV}{2}}^{+\infty} d\varepsilon_x \sum_{n=1}^{M(E)} \sum_{j=0}^{N(\varepsilon_x)} \left[\frac{k_{J-j}^R(\varepsilon_x, V)}{k_0^L(\varepsilon_x, V)} |a_{J \rightarrow j}(\varepsilon_x, V)|^2 F(\varepsilon_x - \mu_L) - \frac{k_{J-j}^L(\varepsilon_x, V)}{k_0^R(\varepsilon_x, V)} |a'_{J \rightarrow j}(\varepsilon_x, V)|^2 F(\varepsilon_x - \mu_R) \right]. \quad (4.34)$$

Como consequência da reversibilidade temporal,

$$\frac{k_{J-j}^R(\varepsilon_x, V)}{k_0^L(\varepsilon_x, V)} |a_{J \rightarrow j}(\varepsilon_x, V)|^2 = \frac{k_{J-j}^L(\varepsilon_x, V)}{k_0^R(\varepsilon_x, V)} |a'_{J \rightarrow j}(\varepsilon_x, V)|^2 \equiv T^{J \rightarrow j}(\varepsilon_x, V). \quad (4.35)$$

Portanto,

$$I_J = \frac{2e}{2\pi\hbar} \int_{\frac{eV}{2}}^{+\infty} d\varepsilon_x [F(\varepsilon_x - \mu_L) - F(\varepsilon_x - \mu_R)] \sum_{j=0}^{N(\varepsilon_x)} T^{J \rightarrow j}(\varepsilon_x, V). \quad (4.36)$$

Este resultado é semelhante à fórmula de Landauer usual, Eq.(2.41), sendo que neste caso $T(\varepsilon_x, V)$ corresponde à soma das probabilidades de transmissão de todos os canais de propagação, elásticos e inelásticos. Isto significa que, neste procedimento, a competição entre canais elásticos e inelásticos foi ignorada. O método que segue, na Seq.(4.2), levará em conta esta competição da forma correta.

4.2 Método Auto-Consistente

4.2.1 Introdução

Nesta seção, nos baseamos completamente no trabalho de Emberly e Kirczenow²², que nos fornece o procedimento correto para se calcular a corrente elétrica em sistemas que apresentam espalhamento inelástico. No referido artigo, são considerados apenas os espalhamentos elástico e inelástico, em que a energia total se conserva. Ou seja, não há espalhamento inelástico real. O ponto principal do trabalho está na correta contabilização de eventos de espalhamento, levando-se em conta todas as possíveis coincidências de energia após a doação ou aceitação de fônons pelo elétron espalhado.

Tomaremos como um exemplo simplificado o caso do Hamiltoniano descrito pelas

Eq.(3.2) e (3.1) com modo harmônico inicial $J = 1$. Neste caso, o elétron incidente sobre o potencial quântico que sofre espalhamento elástico ($1 \rightarrow 1$), com energia ε_x , pode coincidir com estados de espalhamento com emissão de $n = 1, 2, \dots$ fônons ($1 \rightarrow 1 + n$) e com energia inicial $\varepsilon_x + n\hbar\omega$. Além disso, existe a possibilidade de coincidência com o estado único de espalhamento em que há a absorção de um fônon ($1 \rightarrow 0$) e com energia inicial $\varepsilon_x - \hbar\omega$. As coincidências em relação à energia final dos estados de espalhamento criam uma competição entre estados de espalhamento elástico e inelástico. Tal competição inclui elétrons na transmissão e reflexão, desde que a propagação ocorra no mesmo sentido. Esta é uma diferença fundamental em relação ao formalismo de Landauer, em que estados transmitidos e refletidos em lados opostos nunca se afetam.

Como a distribuição de elétrons em um certo estado de espalhamento dependerá das distribuições de outros estados com a mesma energia final, teremos distribuições de não-equilíbrio associadas a cada um desses estados. Essas distribuições serão representadas sempre através da letra “f” minúscula, f . No entanto, cada terminal (L ou R) terá a sua própria distribuição de equilíbrio, definida muito longe da região dos contatos entre amostra e reservatórios de elétrons. Estas serão representadas através da letra “F” maiúscula, F . Será possível fazer a conexão entre as distribuições de equilíbrio e de não-equilíbrio, a partir da conservação de corrente de probabilidade através dos contatos. Na Fig.(4.1), ilustramos a competição entre as diferentes distribuições de não-equilíbrio para o caso em que $J = 1$. A probabilidade de que não ocorra coincidências com o estado de espa-

Figura 4.1 – Distribuições de não-equilíbrio de cada estado de espalhamento com energia final coincidindo com a energia do estado de espalhamento elástico $\{1 \rightarrow 1, L \rightarrow R\}$ (linha roxa). Existem infinitos estados em que há emissão de fônons coincidentes com esse estado (linhas azuis e reticências), porém somente 2 em que há absorção (linhas vermelhas).

lhamento $\{1 \rightarrow 1, L \rightarrow R\}$, representado pela linha roxa, deverá excluir as probabilidades associadas aos estados das linhas vermelhas ($\{1 \rightarrow 0, L \rightarrow R\}$ e $\{1 \rightarrow 0, R \rightarrow R\}$), azuis ($\{1 \rightarrow 2, L \rightarrow R\}$ e $\{1 \rightarrow 2, R \rightarrow R\}$) e reticências ($\{1 \rightarrow 3, L \rightarrow R\}$, $\{1 \rightarrow 3, R \rightarrow R\}$, $\{1 \rightarrow 4, L \rightarrow R\}$, $\{1 \rightarrow 4, R \rightarrow R\}$, ...). Note que a competição entre os estados

elástico transmitido e refletido que se propagam no mesmo sentido, $\{1 \rightarrow 1, L \rightarrow R\}$ e $\{1 \rightarrow 1, R \rightarrow R\}$, é excluída da análise, à semelhança do formalismo de Landauer. Isto é importante para que o método seja coerente com o formalismo tradicional, no caso de espalhamento estritamente elástico. Mais fundamentalmente, isto é justificado pela suposição de terminais incoerentes entre si, com a consequência de que estados provindos de terminais distintos não interferem. Ainda sobre a Fig.(4.1), a probabilidade de que os estados de espalhamento das linhas vermelhas tenham energia final ε_x é $[f_{L \rightarrow R}^{1 \rightarrow 0}(\varepsilon_x - \hbar\omega) + f_{R \rightarrow R}^{1 \rightarrow 0}(\varepsilon_x - \hbar\omega)]$. Para os estados das linhas azuis e reticências, a probabilidade é $[\sum_{n=1}^{+\infty} f_{L \rightarrow R}^{1 \rightarrow 1+n}(\varepsilon_x + n\hbar\omega) + \sum_{n=1}^{+\infty} f_{R \rightarrow R}^{1 \rightarrow 1+n}(\varepsilon_x + n\hbar\omega)]$. Então, a probabilidade de que todos esses estados não coincidam com o estado de espalhamento elástico representado pela linha roxa, com energia constante ε_x , é 1 menos as probabilidades de ocorrência dos demais estados de espalhamento:

$$\begin{aligned}
 & 1 - [f_{L \rightarrow R}^{1 \rightarrow 0}(\varepsilon_x - \hbar\omega) + f_{R \rightarrow R}^{1 \rightarrow 0}(\varepsilon_x - \hbar\omega)] \\
 & - \left[\sum_{n=1}^{+\infty} f_{L \rightarrow R}^{1 \rightarrow 1+n}(\varepsilon_x + n\hbar\omega) + \sum_{n=1}^{+\infty} f_{R \rightarrow R}^{1 \rightarrow 1+n}(\varepsilon_x + n\hbar\omega) \right] \\
 & = 1 - \sum_{j \neq 1} f_{L \rightarrow R}^{1 \rightarrow j}[\varepsilon_x + (j-1)\hbar\omega] - \sum_{j \neq 1} f_{R \rightarrow R}^{1 \rightarrow j}[\varepsilon_x + (j-1)\hbar\omega]. \quad (4.37)
 \end{aligned}$$

Agora, podemos também nos concentrar em um dos estados de espalhamento inelástico da Fig.(4.1) e nos perguntar qual a probabilidade de que não ocorra coincidências com a energia final deste estado. Para o estado $\{1 \rightarrow 0, L \rightarrow R\}$, devemos excluir as possibilidades de coincidências com canais elásticos e inelásticos:

$$\begin{aligned}
 & 1 - [f_{L \rightarrow R}^{1 \rightarrow 1}(\varepsilon_x + \hbar\omega) + f_{R \rightarrow R}^{1 \rightarrow 1}(\varepsilon_x + \hbar\omega)] - f_{R \rightarrow R}^{1 \rightarrow 0}(\varepsilon_x) \\
 & - \left[\sum_{n=1}^{+\infty} f_{R \rightarrow R}^{1 \rightarrow n}(\varepsilon_x + n\hbar\omega) + \sum_{n=1}^{+\infty} f_{L \rightarrow R}^{1 \rightarrow n}(\varepsilon_x + n\hbar\omega) \right] \\
 & = 1 - \sum_{j \neq 0} f_{L \rightarrow R}^{1 \rightarrow j}[\varepsilon_x + j\hbar\omega] - \sum_{j=0}^{+\infty} f_{R \rightarrow R}^{1 \rightarrow j}[\varepsilon_x + j\hbar\omega]. \quad (4.38)
 \end{aligned}$$

$f_{L \rightarrow R}^{1 \rightarrow 1}(\varepsilon_x)$ deve ser proporcional à expressão da Eq.(4.37) e $f_{L \rightarrow R}^{1 \rightarrow 0}(\varepsilon_x)$ proporcional à expressão da Eq.(4.38), já que devemos excluir os eventos com energia final coincidente. A partir de agora, escreveremos tais equações em função das energias finais $\varepsilon'_x = \varepsilon_x$, no caso elástico, e $\varepsilon'_x \neq \varepsilon_x$, no caso inelástico:

$$f_{L \rightarrow R}^{1 \rightarrow 1}(\varepsilon_x) \propto 1 - \sum_{j \neq 1} f_{L \rightarrow R}^{1 \rightarrow j}(\varepsilon_x) - \sum_{j \neq 1} f_{R \rightarrow R}^{1 \rightarrow j}(\varepsilon_x), \quad (4.39)$$

$$f_{L \rightarrow R}^{1 \rightarrow 0}(\varepsilon'_x) \propto 1 - \sum_{j \neq 0} f_{L \rightarrow R}^{1 \rightarrow j}(\varepsilon'_x) - \sum_j f_{R \rightarrow R}^{1 \rightarrow j}(\varepsilon'_x). \quad (4.40)$$

Adicionalmente, temos a equação para as distribuições de estados em que há doação de fônons, a qual exclui as possibilidades de estados de espalhamento terminando na mesma energia ε'_x :

$$f_{L \rightarrow R}^{1 \rightarrow j > 1}(\varepsilon'_x) \propto 1 - \sum_{j' \neq j} f_{L \rightarrow R}^{1 \rightarrow j'}(\varepsilon'_x) - \sum_{j'} f_{R \rightarrow R}^{1 \rightarrow j'}(\varepsilon'_x). \quad (4.41)$$

Podemos notar que todas as distribuições de não-equilíbrio estão relacionadas mutuamente. O principal objetivo desta seção é o de obter uma solução para tais distribuições, através de um método auto-consistente.

4.2.2 Distribuições de não-equilíbrio e cálculo da corrente elétrica

Aqui, generalizaremos as expressões das distribuições dos estados de espalhamento, para um modo inicial genérico J . No caso dos estados de transmissão ($L \rightarrow R$ e $R \rightarrow L$), as distribuições serão proporcionais à distribuição de equilíbrio do terminal de origem (L ou R) e à probabilidade de transmissão. Isto porque os elétrons partem de um terminal seguindo a sua distribuição de equilíbrio e ainda são transmitidos com uma certa probabilidade que depende do potencial quântico em questão. Da mesma forma que nas Eq.(4.39) a (4.41), essas distribuições dos estados de transmissão são também proporcionais à probabilidade de o estado final não estar ocupado através de processos variados que podem levar à mesma energia final. Desta forma,

$$f_{L \rightarrow R}^{J \rightarrow J}(\varepsilon_x) = c_L^J(\varepsilon_x) F(\varepsilon_x - \mu_L) T_{L \rightarrow R}^{J \rightarrow J}(\varepsilon_x) \left[1 - \sum_{j \neq J} f_{L \rightarrow R}^{J \rightarrow j}(\varepsilon_x) - \sum_{j \neq J} f_{R \rightarrow R}^{J \rightarrow j}(\varepsilon_x) \right], \quad (4.42)$$

$$f_{R \rightarrow L}^{J \rightarrow J}(\varepsilon_x) = c_R^J(\varepsilon_x) F(\varepsilon_x - \mu_R) T_{R \rightarrow L}^{J \rightarrow J}(\varepsilon_x) \left[1 - \sum_{j \neq J} f_{R \rightarrow L}^{J \rightarrow j}(\varepsilon_x) - \sum_{j \neq J} f_{L \rightarrow L}^{J \rightarrow j}(\varepsilon_x) \right], \quad (4.43)$$

$$f_{L \rightarrow R}^{J \rightarrow j \neq J}(\varepsilon'_x) = c_L^J(\varepsilon_x) F(\varepsilon_x - \mu_L) T_{L \rightarrow R}^{J \rightarrow j \neq J}(\varepsilon_x) \left[1 - \sum_{j' \neq j} f_{L \rightarrow R}^{J \rightarrow j'}(\varepsilon'_x) - \sum_{j'} f_{R \rightarrow R}^{J \rightarrow j'}(\varepsilon'_x) \right] \quad (4.44)$$

e

$$f_{R \rightarrow L}^{J \rightarrow j \neq J}(\varepsilon'_x) = c_R^J(\varepsilon_x) F(\varepsilon_x - \mu_R) T_{R \rightarrow L}^{J \rightarrow j \neq J}(\varepsilon_x) \left[1 - \sum_{j' \neq j} f_{R \rightarrow L}^{J \rightarrow j'}(\varepsilon'_x) - \sum_{j'} f_{L \rightarrow L}^{J \rightarrow j'}(\varepsilon'_x) \right]; \quad (4.45)$$

em que $c_L^J(\varepsilon_x)$ e $c_R^J(\varepsilon_x)$ são constantes de proporcionalidade, para uma dada energia inicial ε_x e modo de oscilação inicial J . Como os índices indicam, a constante de proporcionalidade é diferente dependendo se o espalhamento tem origem em L ou em R . Similarmente,

para os estados de reflexão:

$$f_{L \rightarrow L}^{J \rightarrow J}(\varepsilon_x) = d_L^J(\varepsilon_x) F(\varepsilon_x - \mu_L) R_{L \rightarrow L}^{J \rightarrow J}(\varepsilon_x) \left[1 - \sum_{j \neq J} f_{L \rightarrow L}^{J \rightarrow j}(\varepsilon_x) - \sum_{j \neq J} f_{R \rightarrow L}^{J \rightarrow j}(\varepsilon_x) \right], \quad (4.46)$$

$$f_{R \rightarrow R}^{J \rightarrow J}(\varepsilon_x) = d_R^J(\varepsilon_x) F(\varepsilon_x - \mu_R) R_{R \rightarrow R}^{J \rightarrow J}(\varepsilon_x) \left[1 - \sum_{j \neq J} f_{R \rightarrow R}^{J \rightarrow j}(\varepsilon_x) - \sum_{j \neq J} f_{L \rightarrow R}^{J \rightarrow j}(\varepsilon_x) \right], \quad (4.47)$$

$$f_{L \rightarrow L}^{J \rightarrow j \neq J}(\varepsilon'_x) = d_L^J(\varepsilon_x) F(\varepsilon_x - \mu_L) R_{L \rightarrow L}^{J \rightarrow j \neq J}(\varepsilon_x) \left[1 - \sum_{j' \neq j} f_{L \rightarrow L}^{J \rightarrow j'}(\varepsilon'_x) - \sum_{j'} f_{R \rightarrow L}^{J \rightarrow j'}(\varepsilon'_x) \right] \quad (4.48)$$

e

$$f_{R \rightarrow R}^{J \rightarrow j \neq J}(\varepsilon'_x) = d_R^J(\varepsilon_x) F(\varepsilon_x - \mu_R) R_{R \rightarrow R}^{J \rightarrow j \neq J}(\varepsilon_x) \left[1 - \sum_{j' \neq j} f_{R \rightarrow R}^{J \rightarrow j'}(\varepsilon'_x) - \sum_{j'} f_{L \rightarrow R}^{J \rightarrow j'}(\varepsilon'_x) \right]. \quad (4.49)$$

Naturalmente, $c_L^J(\varepsilon_x) = d_L^J(\varepsilon_x)$ e $c_R^J(\varepsilon_x) = d_R^J(\varepsilon_x)$, pois o terminal de origem é o mesmo. Estas constantes de proporcionalidade serão obtidas a partir da conservação de corrente de probabilidade. Primeiramente, definiremos uma distribuição de não-equilíbrio total:

$$\tilde{f}_L(\varepsilon_x) \equiv f_{L \rightarrow R}^{J \rightarrow J}(\varepsilon_x) + \sum_{j \neq J} f_{L \rightarrow R}^{J \rightarrow j}(\varepsilon'_x) + f_{L \rightarrow L}^{J \rightarrow J}(\varepsilon_x) + \sum_{j \neq J} f_{L \rightarrow L}^{J \rightarrow j}(\varepsilon'_x), \quad (4.50)$$

onde está subentendido que as energias iniciais são iguais a ε_x para todas as distribuições da soma. As correntes devido a $\tilde{f}_L$ e devido à distribuição de equilíbrio dentro do terminal L devem ser idênticas, devido à conservação do número de partículas, para cada intervalo de energia $d\varepsilon_x$:

$$e d\varepsilon_x g(\varepsilon_x) v(\varepsilon_x) \tilde{f}_L(\varepsilon_x) = e d\varepsilon_x g(\varepsilon_x) v(\varepsilon_x) F(\varepsilon_x - \mu_L), \quad (4.51)$$

em que e é a carga eletrônica, $g(\varepsilon_x)$ a densidade de estados e $v(\varepsilon_x)$ a velocidade. Em 1 dimensão, $g(\varepsilon_x) v(\varepsilon_x)$ é uma constante, logo

$$F(\varepsilon_x - \mu_L) = f_{L \rightarrow R}^{J \rightarrow J}(\varepsilon_x) + \sum_{j \neq J} f_{L \rightarrow R}^{J \rightarrow j}(\varepsilon'_x) + f_{L \rightarrow L}^{J \rightarrow J}(\varepsilon_x) + \sum_{j \neq J} f_{L \rightarrow L}^{J \rightarrow j}(\varepsilon'_x). \quad (4.52)$$

Note que se o problema tratado envolvesse somente o espalhamento elástico, teríamos $F(\varepsilon_x - \mu_L) = F(\varepsilon_x - \mu_L) T_{L \rightarrow R}^{J \rightarrow J}(\varepsilon_x) + F(\varepsilon_x - \mu_L) R_{L \rightarrow L}^{J \rightarrow J}(\varepsilon_x)$, das Eq.(4.42), (4.46) e (4.52). De fato, se aplicarmos a conservação de probabilidade para o espalhamento elástico, $T_{L \rightarrow R}^{J \rightarrow J}(\varepsilon_x) + R_{L \rightarrow L}^{J \rightarrow J}(\varepsilon_x)$, a essa expressão, obtemos $F(\varepsilon_x - \mu_L) = F(\varepsilon_x - \mu_L)$. Da mesma forma,

$$F(\varepsilon_x - \mu_R) = f_{R \rightarrow R}^{J \rightarrow J}(\varepsilon_x) + \sum_{j \neq J} f_{R \rightarrow R}^{J \rightarrow j}(\varepsilon'_x) + f_{R \rightarrow L}^{J \rightarrow J}(\varepsilon_x) + \sum_{j \neq J} f_{R \rightarrow L}^{J \rightarrow j}(\varepsilon'_x). \quad (4.53)$$

A propriedade de reversibilidade temporal nos permite abandonar os subíndices das probabilidades de transmissão e reflexão:

$$T_{L \rightarrow R}^{J \rightarrow j}(\varepsilon_x) = T_{R \rightarrow L}^{J \rightarrow j}(\varepsilon_x) \equiv T^{J \rightarrow j}(\varepsilon_x) \quad (4.54)$$

e

$$R_{L \rightarrow L}^{J \rightarrow j}(\varepsilon_x) = R_{R \rightarrow R}^{J \rightarrow j}(\varepsilon_x) \equiv R^{J \rightarrow j}(\varepsilon_x). \quad (4.55)$$

Das Eq.(4.42), (4.44), (4.46), (4.48) e (4.52), podemos isolar $c_L^J(\varepsilon_x) = d_L^J(\varepsilon_x)$:

$$\begin{aligned} c_L^J(\varepsilon_x) = & \left\{ R^{J \rightarrow J}(\varepsilon_x) \left[1 - \sum_{j \neq J} f_{L \rightarrow L}^{J \rightarrow j}(\varepsilon_x) - \sum_{j \neq J} f_{R \rightarrow L}^{J \rightarrow j}(\varepsilon_x) \right] \right. \\ & + \sum_{j \neq J} R^{J \rightarrow j}(\varepsilon_x) \left[1 - \sum_{j' \neq j} f_{L \rightarrow L}^{J \rightarrow j'}(\varepsilon'_x) - \sum_{j'} f_{R \rightarrow L}^{J \rightarrow j'}(\varepsilon'_x) \right] \\ & + T^{J \rightarrow J}(\varepsilon_x) \left[1 - \sum_{j \neq J} f_{L \rightarrow R}^{J \rightarrow j}(\varepsilon_x) - \sum_{j \neq J} f_{R \rightarrow R}^{J \rightarrow j}(\varepsilon'_x) \right] \\ & \left. + \sum_{j \neq J} T^{J \rightarrow j}(\varepsilon_x) \left[1 - \sum_{j' \neq j} f_{L \rightarrow R}^{J \rightarrow j'}(\varepsilon'_x) - \sum_{j'} f_{R \rightarrow R}^{J \rightarrow j'}(\varepsilon'_x) \right] \right\}^{-1}. \quad (4.56) \end{aligned}$$

Similarmente, das Eq.(4.43), (4.45), (4.47), (4.49) e (4.53), podemos isolar $c_R^J(\varepsilon_x) = d_R^J(\varepsilon_x)$:

$$\begin{aligned} c_R^J(\varepsilon_x) = & \left\{ R^{J \rightarrow J}(\varepsilon_x) \left[1 - \sum_{j \neq J} f_{R \rightarrow R}^{J \rightarrow j}(\varepsilon'_x) - \sum_{j \neq J} f_{L \rightarrow R}^{J \rightarrow j}(\varepsilon'_x) \right] \right. \\ & + \sum_{j \neq J} R^{J \rightarrow j}(\varepsilon_x) \left[1 - \sum_{j' \neq j} f_{R \rightarrow R}^{J \rightarrow j'}(\varepsilon'_x) - \sum_{j'} f_{L \rightarrow R}^{J \rightarrow j'}(\varepsilon'_x) \right] \\ & + T^{J \rightarrow J}(\varepsilon_x) \left[1 - \sum_{j \neq J} f_{R \rightarrow L}^{J \rightarrow j}(\varepsilon'_x) - \sum_{j \neq J} f_{L \rightarrow L}^{J \rightarrow j}(\varepsilon'_x) \right] \\ & \left. + \sum_{j \neq J} T^{J \rightarrow j}(\varepsilon_x) \left[1 - \sum_{j' \neq j} f_{R \rightarrow L}^{J \rightarrow j'}(\varepsilon'_x) - \sum_{j'} f_{L \rightarrow L}^{J \rightarrow j'}(\varepsilon'_x) \right] \right\}^{-1}. \quad (4.57) \end{aligned}$$

O conjunto das Eq.(4.42) a (4.49), (4.56) e (4.57) é capaz de nos fornecer os valores de todas as distribuições dos estados de espalhamento, desde que façamos um “chute inicial” para todas as distribuições. Desta maneira, obtemos um conjunto de soluções que pode ser reinserido nas equações iniciais. O processo é repetido até que se obtenha convergência. Isso é o que chamamos de um método auto-consistente. Nosso “chute inicial” será

$$f_{\alpha \rightarrow \alpha'}^{J \rightarrow j}(\varepsilon_x) = \delta_{j,J} f_{0,\alpha \rightarrow \alpha'}^{J \rightarrow J}(\varepsilon_x) \quad , \quad \alpha = L, R \quad , \quad \alpha' = L, R; \quad (4.58)$$

com

$$f_{0,L \rightarrow R}^{J \rightarrow J}(\varepsilon_x) = F(\varepsilon_x - \mu_L) T^{J \rightarrow J}(\varepsilon_x), \quad (4.59)$$

$$f_{0,R \rightarrow L}^{J \rightarrow J}(\varepsilon_x) = F(\varepsilon_x - \mu_R) T^{J \rightarrow J}(\varepsilon_x), \quad (4.60)$$

$$f_{0,L \rightarrow L}^{J \rightarrow J}(\varepsilon_x) = F(\varepsilon_x - \mu_L) R^{J \rightarrow J}(\varepsilon_x) \quad (4.61)$$

e

$$f_{0,R \rightarrow R}^{J \rightarrow J}(\varepsilon_x) = F(\varepsilon_x - \mu_R) R^{J \rightarrow J}(\varepsilon_x). \quad (4.62)$$

Isto corresponde ao caso de acoplamento muito fraco com o oscilador harmônico, quando a competição devido aos estados de espalhamento inelástico se torna desprezível. O método auto-consistente evoluirá as soluções a partir daí, mesmo que o acoplamento não seja tão fraco assim. No artigo de Emberly e Kirczenow²² nos é apresentado um “chute inicial” que consideramos menos intuitivo: incluem-se nas Eq.(4.59) a (4.62) denominadores com a soma $T^{J \rightarrow J} + R^{J \rightarrow J}$, a qual deve ser igual a 1 na ausência de modos inelásticos. Ambos os “chutes iniciais”, o escolhido neste trabalho e aquele de Emberly e Kirczenow²², levam à convergência das distribuições.

A corrente elétrica total dependerá da diferença de funções de estados de transmissão, integrada sobre todas as possíveis energias de incidência ε_x , similarmente à fórmula de Landauer, Eq.(2.41):

$$I_J = \frac{2e}{2\pi\hbar} \int d\varepsilon_x \sum_j \left[f_{L \rightarrow R}^{J \rightarrow j}(\varepsilon_x) - f_{R \rightarrow L}^{J \rightarrow j}(\varepsilon_x) \right]. \quad (4.63)$$

Daqui em diante, nos referiremos à corrente elétrica devido a processos elásticos:

$$I_J^{(\text{el})} = \frac{2e}{2\pi\hbar} \int d\varepsilon_x \left[f_{L \rightarrow R}^{J \rightarrow J}(\varepsilon_x) - f_{R \rightarrow L}^{J \rightarrow J}(\varepsilon_x) \right], \quad (4.64)$$

e à corrente devido a processos inelásticos:

$$I_J^{(\text{in})} = \frac{2e}{2\pi\hbar} \int d\varepsilon_x \sum_{j \neq J} \left[f_{L \rightarrow R}^{J \rightarrow j}(\varepsilon_x) - f_{R \rightarrow L}^{J \rightarrow j}(\varepsilon_x) \right]. \quad (4.65)$$

Na ausência de acoplamento com o oscilador harmônico, $I_J^{(\text{in})} = 0$ e $I_J^{(\text{el})}$ coincide com a corrente elétrica dada pelo formalismo de Landauer, através da Eq.(2.41).

No próximo capítulo, Cap.(5), faremos uma comparação entre os resultados do método auto-consistente e do formalismo de Landauer, para a delta de Dirac acoplada a uma coordenada harmônica. Este potencial quântico permite a abertura de canais inelásticos de espalhamento, como mostrado no Cap.(3). Assim, procuraremos uma escolha de parâmetros do potencial que leve a uma discrepância evidente entre os métodos. Veremos que

isto é alcançado escolhendo o oscilador harmônico quântico inicialmente excitado, além do acoplamento forte. Adicionalmente, para a versão atrativa deste potencial quântico, observaremos o efeito das ressonâncias de Fano na corrente elétrica.

CAPÍTULO 5

Resultados - Distribuições de Não-Equilíbrio e Corrente Elétrica

Aqui, discutiremos os resultados para as distribuições de não-equilíbrio e corrente elétrica, segundo o método auto-consistente discutido na Seq.(4.2). O potencial quântico que descreve a amostra é aquele da delta de Dirac acoplada a uma coordenada harmônica. Estaremos considerando potenciais químicos à direita e à esquerda do potencial: $\mu_L = \varepsilon_F + \frac{eV}{2}$ e $\mu_R = \varepsilon_F - \frac{eV}{2}$, como ilustrado na Fig.(2.7). Esta diferença de potenciais químicos entrará somente nas distribuições de Fermi de equilíbrio, sendo desconsiderado na descrição do potencial quântico. Justificamos isto no exemplo da Seq.(2.4), quando vimos que abaixo de $eV = \frac{\varepsilon_F}{2}$ a inclusão de um potencial degrau devido à diferença de potencial entre os dois lados da amostra é irrelevante. Aqui também vamos nos limitar a diferenças de energia potencial abaixo deste valor. Da mesma forma que no formalismo de Landauer usual, utilizaremos as probabilidades de transmissão através do potencial quântico como ponto de partida. Tais probabilidades são obtidas como no Cap.3, resolvendo um sistema de $M + 1$ equações acopladas para as amplitudes. Em geral, escolhemos M acima de 30 para assegurar a convergência. Também tomamos o cuidado de escolher ω e $b\gamma$ que atendam à condição de convergência da Eq.(3.26).

5.1 Distribuições de Não-Equilíbrio

Para simplificar a notação, reescreveremos a Eq.(4.42) como

$$f_{L \rightarrow R}^{J \rightarrow J}(\varepsilon_x) = c_L^J(\varepsilon_x) F(\varepsilon_x - \mu_L) T^{J \rightarrow J}(\varepsilon_x) - [\epsilon_{LR}^J(\varepsilon_x) + \epsilon_{RR}^J(\varepsilon_x)], \quad (5.1)$$

com

$$\epsilon_{\alpha\beta}^J(\varepsilon_x) \equiv c_\alpha^J(\varepsilon_x) F(\varepsilon_x - \mu_\alpha) T^{J \rightarrow J}(\varepsilon_x) \sum_{j \neq J} f_{\alpha \rightarrow \beta}^{J \rightarrow j}(\varepsilon_x). \quad (5.2)$$

Vamos nos referir daqui em diante a c_L^J , ϵ_{LR}^J e ϵ_{RR}^J como correções de $F(\varepsilon_x - \mu_\alpha) T^{J \rightarrow J}(\varepsilon_x)$. Isto porque no limite de acoplamento nulo, $c_L^J = 1$ e $\epsilon_{LR}^J = \epsilon_{RR}^J = 0$ e recaímos no caso de equilíbrio.

Na Fig.(5.1), temos a comparação entre $\sum_j f_{0 \rightarrow j}^{L \rightarrow R}(\varepsilon_x)$ e $T^{0 \rightarrow 0}(\varepsilon_x) F(\varepsilon_x - \mu_L)$, no quadro superior, e $\sum_{j \neq J} f_{0 \rightarrow j}^{L \rightarrow R}$, no quadro inferior. Todas as curvas são nulas acima de $\varepsilon_x = \varepsilon_F + \frac{eV}{2}$. Isto porque esta é a energia correspondente ao potencial químico μ_L . Acima desta energia, não deve haver ocupação, como acontece para a distribuição de equilíbrio $F(\varepsilon_x - \mu_L)$. Isto para temperatura muito menor que a temperatura de Fermi (energia de Fermi sobre a constante de Boltzmann). Aumentando a temperatura, acima da temperatura de Fermi, as distribuições tendem a cair a zero mais suavemente. A curva de $\sum_j f_{0 \rightarrow j}^{L \rightarrow R}(\varepsilon_x)$, em preto, tem a forma da ressonância de Fano preservada, já que tal ressonância encontra-se posicionada abaixo de μ_L . As correções só contribuem acima de $\varepsilon_x = \hbar\omega$, já que abaixo desta energia não há processos inelásticos. Isto explica porque só observamos discrepâncias entre as curvas da Fig.(5.1) acima desta mesma energia.

A Fig.(5.2) se refere ao potencial inicialmente no modo excitado $J = 3$. Neste caso, observamos discrepâncias entre $\sum_j f_{3 \rightarrow j}^{L \rightarrow R}$ e $T^{3 \rightarrow 3} F_L$, mesmo abaixo de $\varepsilon_x = \hbar\omega$ (para os parâmetros escolhidos, $\varepsilon_x/|\mu| = 5$). Isto porque abaixo desta energia, existe a possibilidade de o oscilador harmônico transferir um ou mais quanta de energia para o elétron incidente. Tais modos estão ligados a probabilidades de transmissão não-nulas em $\sum_{j \neq J} f_{3 \rightarrow j}^{L \rightarrow R}$, como demonstrado no segundo quadro da Fig.(5.2). De fato, as correções se fazem presentes entre $\varepsilon_x = 0$ e $\varepsilon_x = \frac{eV}{2} + \varepsilon_F$.

Figura 5.1 – No quadro superior: comparação entre o produto $T^{0 \rightarrow 0} F_L$ (em vermelho) e a soma das distribuições de não-equilíbrio relacionadas com a transmissão ($L \rightarrow R$), em que o oscilador harmônico está inicialmente parado ($J = 0$). No quadro inferior: soma dos modos inelásticos. Esta soma só contribui acima de $\hbar\omega$, quando o elétron é capaz de excitar o oscilador harmônico a um novo modo de oscilação. Todas as curvas caem a zero em $\frac{eV}{2} + \varepsilon_F$, pois esta é a energia máxima da população de elétrons à esquerda do potencial quântico, em temperatura muito menor que a temperatura de Fermi. Escolha de parâmetros: $J = 0$, $\tilde{b} = 1$, $\hbar\omega/|\mu| = 5$, $\gamma/|\mu| = 0.5$, $\varepsilon_F/|\mu| = 5$, $k_B T \ll \varepsilon_F$ e $eV/|\mu| = 10$. Por simplicidade notacional, definimos aqui $F_\alpha \equiv F(\varepsilon_x - \mu_\alpha)$.

Figura 5.2 – No quadro superior: comparação entre o produto $T^{3 \rightarrow 3} F_L$ (em vermelho) e a soma das distribuições de não-equilíbrio relacionadas com a transmissão ($L \rightarrow R$), em que o oscilador harmônico está inicialmente em seu terceiro modo excitado ($J = 3$). No quadro inferior: soma dos modos inelásticos. Escolha de parâmetros: $J = 3$, $\tilde{b} = 1$, $\hbar\omega/|\mu| = 5$, $\gamma/|\mu| = 0.5$, $\varepsilon_F/|\mu| = 5$, $k_B T \ll \varepsilon_F$ e $eV/|\mu| = 10$.

5.2 Corrente Elétrica

Mostraremos o efeito das ressonâncias de Fano sobre as curvas da corrente elétrica, o que evidencia a existência de estados quasi-estacionários no processo de espalhamento. Adicionalmente, mostraremos que para um acoplamento forte com o oscilador harmônico é possível obtermos uma discrepância grande entre os resultados dados pelo método auto-consistente e pelo formalismo de Landauer.

Trabalharemos em um regime de voltagens baixas, em que $eV < \frac{\varepsilon_F}{2}$, quando a diferença entre os números de onda à direita e à esquerda do potencial é mínima. Isto está de acordo com o que argumentamos na Subseç.(2.4.3), através da análise da corrente elétrica na Fig.(2.11). Lá, mostramos que podemos descrever a amostra desconsiderando o termo de potencial degrau, sem afetar significativamente o resultado da corrente elétrica. Isto não deve afetar nossa análise, pois estamos interessados na possibilidade de se acessar estados quasi-estacionários. Podemos acessá-los neste regime de voltagens desde que $\varepsilon_r < \frac{5}{4}\varepsilon_F$, em que ε_r é o nível da ressonância de Fano do modo elástico, pois o potencial químico à esquerda deve estar abaixo da energia de ressonância: $\varepsilon_F + \frac{eV}{2} < \varepsilon_r$ e $eV < \frac{\varepsilon_F}{2}$.

5.2.1 Evidências de Estados Quasi-Estacionários na Corrente Elétrica

A corrente elétrica associada aos modos elásticos é descrita pela Eq.(4.64). A partir da Eq.(5.1), podemos reescrevê-la em termos das correções c_L^J , c_R^J , ϵ_{LR}^J , ϵ_{LL}^J , ϵ_{RL}^J e ϵ_{RR}^J :

$$\begin{aligned} \frac{I_J^{(\text{el})}}{i_0} = & \int d\varepsilon_x c_L^J(\varepsilon_x) T^{J \rightarrow J}(\varepsilon_x) F(\varepsilon_x - \mu_L) - \int d\varepsilon_x [\epsilon_{LR}^J(\varepsilon_x) + \epsilon_{RR}^J(\varepsilon_x)] \\ & - \int d\varepsilon_x c_R^J(\varepsilon_x) T^{J \rightarrow J}(\varepsilon_x) F(\varepsilon_x - \mu_R) + \int d\varepsilon_x [\epsilon_{RL}^J(\varepsilon_x) + \epsilon_{LL}^J(\varepsilon_x)], \quad (5.3) \end{aligned}$$

em que $i_0 \equiv 2e/2\pi\hbar$ é a unidade fundamental de corrente elétrica e $\epsilon_{\alpha\beta}^J$ é dado pela Eq.(5.2). Para temperatura nula, as distribuições de equilíbrio (funções de Fermi) são funções de Heaviside. Então,

$$\begin{aligned} \frac{I_J^{(\text{el})}}{i_0} = & \int_0^{\mu_L} d\varepsilon_x c_L^J(\varepsilon_x) T^{J \rightarrow J}(\varepsilon_x) + \int_0^{\mu_L} d\varepsilon_x [\epsilon_{LL}^J(\varepsilon_x) - \epsilon_{LR}^J(\varepsilon_x)] \\ & - \int_0^{\mu_R} d\varepsilon_x c_R^J(\varepsilon_x) T^{J \rightarrow J}(\varepsilon_x) + \int_0^{\mu_R} d\varepsilon_x [\epsilon_{RL}^J(\varepsilon_x) - \epsilon_{RR}^J(\varepsilon_x)]. \quad (5.4) \end{aligned}$$

Podemos considerar que a voltagem máxima desejada é insuficiente para excitar o oscilador harmônico além de seu modo inicial, $\mu_R < \mu_L < \hbar\omega$, que é o mesmo que $eV < 2(\hbar\omega - \varepsilon_F)$, para $\mu_L = \varepsilon_F + \frac{eV}{2}$. No caso especial em que $J = 0$, não há competição entre canais elásticos e inelásticos e obtemos

$$\frac{I_0^{(\text{el})}}{i_0} = \int_{\mu_R}^{\mu_L < \hbar\omega} d\varepsilon_x T^{0 \rightarrow 0}(\varepsilon_x). \quad (5.5)$$

No caso em que o oscilador harmônico está inicialmente excitado ($J > 0$), devemos levar em conta todos termos da Eq.(5.4). Analisemos $I_0^{(\text{el})}$, para uma faixa mínima de voltagens que permita que o elétron tenha energia suficiente para cair na ressonância de Fano do modo elástico, mas insuficiente para acessar o primeiro canal inelástico. Esta situação é ilustrada na Fig.(5.3). Da Eq.(3.53), podemos substituir o perfil de Fano na Eq.(5.5), obtendo

Figura 5.3 – Esquema das populações de elétrons nos lados direito e esquerdo do potencial delta de Dirac, sem e com a aplicação de diferença de potencial. À esquerda ilustramos uma possível escolha dos níveis de energia na ausência de diferença de potencial entre os lados opostos da delta. O nível da ressonância de Fano do modo elástico encontra-se acima da energia de Fermi. O nível $\hbar\omega$ é a energia acima da qual é possível que o elétron incidente excite o oscilador harmônico ao seu próximo modo de oscilação. À direita ilustramos a situação em que a voltagem aplicada eleva o potencial químico à esquerda o suficiente para que cruze exatamente com o nível da ressonância. Nesta voltagem ainda não existem modos em que o oscilador tenha sido excitado pelo elétron incidente.

$$\frac{I_0}{i_0}(eV) \approx \int_{\varepsilon_F - \frac{eV}{2}}^{\varepsilon_F + \frac{eV}{2}} d\varepsilon_x T_0^{0 \rightarrow 0}(\varepsilon_x) \frac{(\epsilon + q)^2}{\epsilon^2 + 1}, \quad (5.6)$$

com ϵ dado pela Eq.(3.54) e q pela Eq.(3.55). Esta é uma expressão aproximada para a corrente, pois o perfil de Fano da Eq.(3.53) foi obtido primeiramente supondo que as amplitudes caíam muito rápido com a ordem do modo de oscilação ($a_{0 \rightarrow 3} = 0$). Isto exige um acoplamento muito fraco com o oscilador harmônico ($\tilde{b}\gamma/|\mu| \ll 1$). Aproximando

$T_0^{0 \rightarrow 0}(\varepsilon_x)$ para uma constante nessa faixa de diferença de potencial em que há ressonância:

$$\frac{I_0}{i_0}(eV) \approx T_0^{0 \rightarrow 0}(\varepsilon_r) \int_{\frac{2}{\Gamma}(\varepsilon_F - \frac{eV}{2} - \varepsilon_r)}^{\frac{2}{\Gamma}(\varepsilon_F + \frac{eV}{2} - \varepsilon_r)} d\epsilon \frac{(\epsilon + q)^2}{\epsilon^2 + 1}. \quad (5.7)$$

Para integrar $\int (\epsilon + q)^2 / (\epsilon^2 + 1)$, expandimos $(\epsilon + q)^2$ como $\epsilon^2 + 2q\epsilon + q^2$ e utilizamos o fato de que $\int 1/(1 + \epsilon^2) = \arctan(\epsilon)$. Desta forma,

$$\begin{aligned} \frac{I_0}{i_0}(eV) \approx T_0^{0 \rightarrow 0}(\varepsilon_r) & \left[(q^2 - 1)\arctan(\epsilon) + q\log(\epsilon^2 + 1) + \epsilon \right] \Big|_{\epsilon = \frac{2}{\Gamma}(\varepsilon_F + \frac{eV}{2} - \varepsilon_r)} \\ & - T_0^{0 \rightarrow 0}(\varepsilon_r) \left[(q^2 - 1)\arctan(\epsilon) + q\log(\epsilon^2 + 1) + \epsilon \right] \Big|_{\epsilon = \frac{2}{\Gamma}(\varepsilon_F - \frac{eV}{2} - \varepsilon_r)}. \end{aligned} \quad (5.8)$$

Escolheremos o nível de ressonância acima da energia de Fermi ($\varepsilon_r > \varepsilon_F$), de modo que com o aumento da voltagem seja possível que o potencial químico $\mu_L = \varepsilon_F + \frac{eV}{2}$ cruze com este nível. Isto é mostrado na Fig.(5.3), em que o cruzamento acontece quando $eV = 2(\varepsilon_r - \varepsilon_F)$. Como efeito, temos o aparecimento de um degrau na curva da corrente elétrica *versus* a voltagem aplicada, Fig.(5.4), quando o limite superior de integração se anula: $\epsilon = \frac{2}{\Gamma}(\varepsilon_F + \frac{eV}{2} - \varepsilon_r) = 0$, no primeiro termo da Eq.(5.8),

$$T_0^{0 \rightarrow 0}(\varepsilon_r) \left[(q^2 - 1)\arctan(\epsilon) + q\log(\epsilon^2 + 1) + \epsilon \right] \Big|_{\epsilon = \frac{2}{\Gamma}(\varepsilon_F + \frac{eV}{2} - \varepsilon_r)}. \quad (5.9)$$

O comportamento a que estamos nos referindo como de degrau corresponde a uma queda do valor da derivada da curva. Esta queda ocorre, pois os estados quasi-estacionários passam a ser acessíveis, afetando negativamente no crescimento da corrente com a voltagem. Claramente, o degrau é uma assinatura não-linear da corrente elétrica e vemos que o mesmo pode ocorrer independentemente de estarmos trabalhando em um regime de voltagens baixas. Na Fig.(5.4), a variação da posição dos degraus com a escolha do acoplamento ocorre devido à dependência de ε_r com γ^2 , segundo a Eq.(3.51). Em outras palavras, aumentando o acoplamento com os modos harmônicos, estamos abaixando os níveis de estados quasi-estacionários, de modo que estes se tornam acessíveis para diferenças de potencial menores. Além disso, segundo a Eq.(3.52), a largura da ressonância aumenta com γ^2 , de modo que os degraus devem ficar mais suaves à medida que aumentamos o acoplamento. Para demonstrar que a expressão da Eq.(5.8) descreve bem a corrente elástica na região do degrau, fizemos o ajuste da Fig.(5.5). O ajuste resultou em $\chi^2 = 0.9991$, para pontos entre $eV/|\mu| = 0.2$ e 1.25 . χ^2 próximo de 1, como é o caso, indica um bom ajuste da curva com relação à variância. Seu valor estar abaixo de 1 também indica que a variância foi superestimada.

Figura 5.4 – Efeito na corrente elétrica total do cruzamento com o nível da ressonância de Fano, para o oscilador inicialmente no modo $J = 0$ e diferentes valores do acoplamento γ em unidades de $|\mu|$. Escolhemos o nível da ressonância de Fano acima de ε_F , como esquematizado na Fig.(5.3). O cruzamento acontece quando $eV = 2(\varepsilon_r - \varepsilon_F)$, sendo que o nível da ressonância, ε_r , varia com γ . Por isso, à medida que aumentamos o acoplamento, o degrau ocorre para voltagens cada vez mais baixas. Adicionalmente, a largura da ressonância de Fano aumenta com γ^2 , de modo que o degrau se torna cada vez mais suave. Escolha de parâmetros: $\tilde{b} = 1$, $\omega/|\mu| = 6$, $\varepsilon_F/|\mu| = 5$ e $k_B T \ll \varepsilon_F$.

5.2.2 Comparação com o Formalismo de Landauer

Esperamos que haja divergência entre os resultados obtidos através do método auto-consistente e aqueles obtidos do formalismo de Landauer inelástico, expostos no Cap.(4), apenas para voltagens em que é possível o acesso a canais inelásticos. No método auto-consistente, utilizamos a corrente elétrica como dada pela Eq.(4.63); enquanto no método do formalismo de Landauer, utilizamos a Eq.(4.36).

Na Fig.(5.6), ilustramos o caso em que escolhemos o oscilador inicialmente no primeiro estado excitado ($J = 1$) e uma constante de acoplamento forte. Desta forma, o elétron incidente pode receber um quantum de energia do oscilador harmônico para quaisquer valores de voltagem, de modo que um canal inelástico é sempre acessível. Encontramos correntes elétricas, calculadas através dos dois métodos, que diferem em aproximadamente 38%, abaixo de $eV = \frac{\varepsilon_F}{2}$. Esta é a diferença de energia potencial abaixo da qual concluímos ser razoável desprezar o efeito de distorção do potencial quântico devido à aplicação da voltagem, como exposto na Subseç.(2.4.3). Para os casos em que o oscilador harmônico encontra-se inicialmente em repouso ($J = 0$), não conseguimos encontrar

Figura 5.5 – Ajuste da corrente elástica, através da expressão da Eq.(5.8), na faixa de voltagens em que os estados quasi-estacionários são acessíveis. Escolha de parâmetros: $J = 0$, $\tilde{b} = 1$, $\omega/|\mu| = 6$, $\gamma/|\mu| = 0.4$, $\varepsilon_F = 5$ e $k_B T \ll \varepsilon_F$. O ajuste nos forneceu, com $\chi^2 = 0.9991$, para pontos entre $eV/|\mu| = 0.2$ e 1.25 : $\Gamma/|\mu| = 0.4354$, $T_0^{0 \rightarrow 0}(\varepsilon_r) = 0.3124$, $q = 0.3194$ e $\varepsilon_r/|\mu| = 4.7533$.

discrepâncias relevantes, mesmo para acoplamento forte: encontramos diferenças de 1%, a partir da voltagem em que o canal inelástico é aberto.

Nossos resultados para a corrente elétrica se basearam fortemente no fato de que podemos desprezar o efeito da voltagem na expressão do potencial quântico, para voltagens suficientemente baixas. Assim, tomamos como ponto de partida as probabilidades de transmissão do potencial delta acoplado a uma coordenada harmônica, como feito no Cap.(3). Incluímos a voltagem aplicada entre os dois lados do potencial apenas nas distribuições de equilíbrio (distribuições de Fermi). Nossos resultados demonstraram que podemos observar o efeito de ressonâncias de Fano, desde que o nível de ressonância seja acessado dentro da faixa de voltagens permitidas pela nossa aproximação ($eV < \frac{\varepsilon_F}{2}$). O efeito é não-linear, mesmo para esta faixa de voltagens. Ajustamos a curva da corrente *versus* a voltagem aplicada, na região em que este efeito aparece, demonstrando que podemos descrever tal efeito através do perfil de Fano da Eq.(3.53). Por fim, mostramos que uma discrepância relativamente grande pode ser observada entre os resultados do método auto-consistente e do formalismo de Landauer, se consideramos o oscilador harmônico inicialmente excitado e um acoplamento muito forte com o oscilador harmônico. Destacamos que o comportamento da corrente, neste caso, é linear com a voltagem aplicada; pois não há acesso a ressonâncias de Fano.

Figura 5.6 – Comparação entre resultados da corrente elétrica obtidos pelo método auto-consistente e o formalismo de Landauer. O primeiro é aquele que leva em conta corretamente a competição entre canais elásticos e inelásticos. O método auto-consistente apresenta uma corrente 38% menor com relação ao obtido a partir do formalismo de Landauer. Escolha de parâmetros: $J = 1$, $\tilde{b} = 1/100$, $\gamma/|\mu| = 120$, $\omega/|\mu| = 5$, $\varepsilon_F/|\mu| = 0.1$ e $k_B T \ll \varepsilon_F$.

CAPÍTULO 6

Conclusões

Inicialmente, estudamos o formalismo de Landauer de duas formas distintas, mas equivalentes: em primeira e em segunda quantização. A derivação em segunda quantização nos dá uma visão detalhada dos processos de criação e aniquilação de partículas nos diferentes canais de espalhamento, anteriormente à média que é feita para se obter a corrente elétrica. Esta foi a base para compreendermos a conexão entre as probabilidades de transmissão através de um potencial quântico e o cálculo da corrente elétrica, quando ligamos a amostra real modelada por tal potencial a reservatórios de elétrons. O exemplo do potencial delta de Dirac foi usado tanto para exemplificar o cálculo da corrente elétrica, como para dar as diretrizes para o mesmo cálculo no caso da delta acoplada a uma coordenada harmônica. Tal potencial quântico é o nosso modelo para uma heteroestrutura semicondutora em que a camada contendo impurezas é muito fina. Analisamos a inclusão da voltagem como um termo adicional de potencial degrau no Hamiltoniano. Vimos que para uma voltagem aplicada menor que metade da energia de Fermi, a diferença entre as correntes elétricas obtidas para a delta simples e a delta mais degrau é mínima. Isto porque para voltagens tão baixas, os números de onda dos lados opostos do potencial são praticamente iguais. Esta é a nossa justificativa para no passo seguinte do trabalho termos desprezado este termo de degrau, ao acoplarmos a delta de Dirac a um oscilador harmônico quântico. Isto permitiu a simplificação de nossos cálculos, mas ressaltamos que o regime de voltagens baixas a que nos restringimos não afeta a análise pretendida. Para

a delta acoplada, nos importa a possibilidade de se acessar estados quasi-estacionários, o que pode ser atingido mesmo para voltagens baixas, desde que $\varepsilon_r < \frac{5}{4}\varepsilon_F$, pois $\varepsilon_F + \frac{eV}{2} < \varepsilon_r$ e $eV < \frac{\varepsilon_F}{2}$.

Para as probabilidades de transmissão do potencial delta acoplado a uma coordenada harmônica, discutimos resultados já conhecidos na literatura^{16-21,42}. Estes podem ser resumidos, para curvas da probabilidade de transmissão *versus* a energia de incidência do elétron, em: bicos devido à conservação da probabilidade, para ambos potenciais repulsivo e atrativo; e ressonâncias altamente assimétricas (ressonâncias de Fano), para o potencial atrativo. Neste trabalho, damos enfoque ao potencial atrativo, para o qual mostramos que as ressonâncias são reflexo da mudança de fase na interferência entre amplitudes do espectro contínuo de energias de incidência e do espectro discreto da energia de estado ligado adicionado de um ou mais quanta de energia. A mudança de fase é abrupta, em termos de energia, levando a interferência de destrutiva a construtiva. Isto determina o perfil assimétrico das ressonâncias de Fano.

Para o potencial quântico de interesse, há a possibilidade de espalhamento inelástico, do ponto de vista do elétron. Isto porque o elétron pode trocar energia com o oscilador harmônico. Seguindo a discussão presente no trabalho de Emberly e Kirczenow²², mostramos que o modo correto de se calcular a corrente elétrica em sistemas deste tipo deve ser baseado em um método auto-consistente. A justificativa é a de que inúmeros processos de espalhamento inelásticos podem ter sua energia final coincidindo com a energia final de um processo elástico, ou ainda de outros processo inelásticos. Assim, quando calculamos a probabilidade de ocorrência de um dado processo de espalhamento, devemos aplicar o princípio de exclusão de Pauli para contabilizar corretamente o efeito de estados coincidentes. Tal contabilização não é feita no formalismo de Landauer usual, já que o mesmo não foi elaborado para descrever problemas desta natureza.

Por fim, calculamos as distribuições de não-equilíbrio do método auto-consistente e as correntes elétricas. Nossos resultados mostram que toda vez que estados quasi-estacionários se tornam disponíveis para uma dada diferença de potencial, a curva da corrente sofre uma queda em seu coeficiente angular. Pois, elétrons são tragados pelo potencial, no processo de espalhamento, prejudicando o crescimento da corrente com a voltagem aplicada em uma faixa limitada de energia. Mostramos uma expressão analítica que descreve este efeito, que é basicamente a integral do perfil de Fano. O ajuste desta expressão com os resultados numéricos foi satisfatório. Com isso, demonstramos uma assinatura do acoplamento do potencial com fônons, a qual poderia, em princípio, ser observada na medida da corrente elétrica. No entanto, sabemos que nosso modelo é bastante idealizado. Além disso, esperamos que as ressonâncias de Fano sejam bastante

estreitas, devido a um acoplamento muito fraco nos sistemas reais. Assim, obteríamos degraus igualmente estreitos e, portanto, imperceptíveis aos olhos do experimental.

Obtivemos discrepâncias entre as correntes elétricas totais obtidas do formalismo de Landauer e do método auto-consistente, para um acoplamento relativamente forte. Estas discrepâncias são esperadas, pois estamos aplicando o formalismo usual fora de seu domínio de validade, isto é, em um problema que envolve espalhamento inelástico através da amostra. Para acoplamento fraco este efeito é mínimo e qualquer média que priorize estados iniciais de energia mais baixa (por exemplo, $J = 0$), tornará a divergência entre os métodos insignificante. Não obstante, conseguimos capturar através de nosso estudo a essência do modelo e a importância da substituição do formalismo de Landauer pelo método auto-consistente, nos casos em que o elétron se espalha inelasticamente.

Propomos como trabalho futuro a substituição do potencial quântico aqui estudado pela sua versão dependente de spin, para descrever uma heteroestrutura semicondutora contendo uma camada muito fina com impurezas magnéticas (Mn). Neste caso, a intensidade do potencial delta de Dirac será representada por uma matriz 12×12 que dará conta da interação entre o spin $1/2$ do elétron incidente e o spin $5/2$ de uma impureza magnética (Mn) acoplada à delta. Será, então, possível separar a corrente elétrica em contribuições *up* e *down*, de modo que poderemos verificar um possível efeito de filtragem. Isto deverá ser feito utilizando-se o método auto-consistente aqui estudado, no caso de acoplamento não-nulo com a coordenada harmônica.

REFERÊNCIAS

- 1 DATTA, S. *Electronic transport in mesoscopic systems*. Cambridge: Cambridge University Press, 1997. p.48–112. (Cambridge Studies in Semiconductor Physics and Microelectronic Engineering).
- 2 STONE, A. D.; SZAFER, A. What is measured when you measure a resistance? – the Landauer formula revisited. *IBM Journal of Research and Development*, v.32, n.3, p.384–413, 1988.
- 3 AKULIN, V. M. et al. Tunneling electroconductance of atomic Bose-Einstein condensates. *Physical Review A*, v.79, n.6, p.063614, June 2009.
- 4 BRANTUT, J. -P. et al. *Conduction of ultracold Fermions through a mesoscopic channel*. Disponível em: <<http://arxiv.org/pdf/1203.1927.pdf>>. Acesso em: 19 set. 2012.
- 5 WOLTER, M. et al. Response of the electric conductivity of double-stranded DNA on moderate mechanical stretching stresses. *Physical Review B*, v.85, n.7, p.075101, Feb. 2012.
- 6 SAFFARZADEH, A.; FARGHADAN, R. A spin-filter device based on armchair graphene nanoribbons. *Applied Physics Letters*, v.98, n.2, p.023106, Jan. 2011.
- 7 RICHTER, K. *Semiclassical theory of mesoscopic quantum systems*. Berlin: Springer Verlag, 2000. (Springer Tracts in Modern Physics, v.161).

- 8** LANDAUER, R. Spatial variation of currents and fields due to localized scatterers in metallic conduction (and comment). *Journal of Mathematical Physics*, v.37, n.10, p.5259–5268, 1996.
- 9** LANDAUER, R. Electrical resistance of disordered one-dimensional lattices. *Philosophical Magazine*, v.21, n.172, p.863–867, 1970.
- 10** ECONOMOU, E. N.; SOUKOULIS, C. M. Static conductance and scaling theory of localization in one dimension. *Physical Review Letters*, v.46, n.9, p.618–621, Mar. 1981.
- 11** FISHER, D. S.; LEE, P. A. Relation between conductivity and transmission matrix. *Physical Review B*, v.23, n.12, p.6851–6854, June 1981.
- 12** ENGQUIST, H. -L.; ANDERSON, P. W. Definition and measurement of the electrical and thermal resistances. *Physical Review B*, v.24, n.2, p.1151–1154, July 1981.
- 13** BÜTTIKER, M. et al. Generalized many-channel conductance formula with application to small rings. *Physical Review B*, v.31, n.10, p.6207–6215, May 1985.
- 14** VAN WEES B. J. et al. Quantized conductance of point contacts in a two-dimensional electron gas. *Physical Review Letters*, v.60, n.9, p.848–850, Feb. 1988.
- 15** WHARAM D. A. et al. One-dimensional transport and the quantisation of the ballistic resistance. *Journal of Physics C: Solid State Physics*, v.21, n.8, p.L209-L214, Jan. 1988.
- 16** CAI, W. et al. Resonance of the one-dimensional electron transmission above a quantum well with dissipation. *Physical Review B*, v.41, n.6, p.3513–3516, Feb. 1990.
- 17** GELFAND, B. Y.; SCHMITT-RINK, S.; LEVI, A. F. J. Tunneling in the presence of phonons: a solvable model. *Physical Review Letters*, v.62, n.14, p.1683–1686, Apr. 1989.
- 18** LOPEZ-CASTILLO, J. -M.; TANNOUS, C.; JAY-GERIN, J. -P. Electron tunneling in the presence of phonons: classical versus quantum oscillating thin potential barrier. *Physical Review A*, v.41, n.5, p.2273–2276, Mar. 1990.
- 19** BRANDES, T.; ROBINSON, J. Transmission through a quantum dynamical delta

barrier. *Physica Status Solidi B*, v.234, n.1, p.378–384, 2002.

20 DE OLIVEIRA, B. P. W.; HASS, S. Electron-phonon bound states and impurity band formation in quantum wells. *Physical Review B*, v.79, n.15, p.155102, Apr. 2009.

21 MAGRUDER K. C.; LEVI A. F. J. Quantum and semiclassical inelastic electron transport. *Physical Review B*, v.81, n.23, p.235312, June 2010.

22 EMBERLY, E. G.; KIRCZENOW, G. Landauer theory, inelastic scattering, and electron transport in molecular wires. *Physical Review B*, v.61, n.8, p.5740–5750, Feb. 2000.

23 FLOOD, A. H. et al. Whence molecular electronics? *Science*, v.306, n.5704, p.2055–2056, 2004.

24 BASTARD, G. Wave mechanics applied to semiconductor heterostructures. Les Ulis: Les Éditions de Physique, 1988.

25 MIROSHNICHENKO, A. E.; FLACH, S.; KIVSHAR, Y. S. Fano resonances in nanoscale structures. *Reviews of Modern Physics*, v.82, n.3, p.2257–2298, Aug. 2010.

26 FANO, U. Effects of configuration interaction on intensities and phase shifts. *Physical Review*, v.124, n.6, p.1866–1878, Dec. 1961.

27 REDNER, S. *Citation statistics from more than a century of physical review*. Disponível em: <<http://arxiv.org/pdf/physics/0407137v2.pdf>>. Acesso em: 19 set. 2012.

28 BEUTLER, H. Über absorptionsserien von argon, krypton und xenon zu termen zwischen den beiden ionisierungsgrenzen $^2P_3^{2/0}$ und $^2P_1^{2/0}$. *Zeitschrift für Physik*, v.93, n.3–4, p.177–196, 1935.

29 JOE, Y. S.; SATANIM; A. M.; KIM, C. S. Classical analogy of Fano resonances. *Physica Scripta*, v.74, p.259–266, Jan. 2006. DOI:10.1088/0031-8949/74/2/020.

30 KRONER, M. et al. The nonlinear Fano effect. *Nature*, v.451, n.7176, p.311–314, Mar. 2006.

- 31** YOON Y. et al. Detector backaction on the self-consistent bound state in quantum point contacts. *Physical Review B*, v.79, n.12, p.121304, Mar. 2009.
- 32** HOLFELD, C. P. et al. Fano resonances in semiconductor superlattices *Physical Review Letters*, v.81, n.4, p.874–877, July 1998.
- 33** IMRY, Y.; LANDAUER, R. Conductance viewed as transmission. *Reviews of Modern Physics*, v.71, n.2, p.S306–S312, Mar. 1999.
- 34** BÜTTIKER, M. Four terminal phase coherent conductance *Physical Review Letters*, v.57, n.14, p.1761–1764, Oct. 1986.
- 35** SAKURAI J. J.; TUAN, S. F. *Modern quantum mechanics*. New York: Addison-Wesley Publishing Company, 1994. p.379–386.
- 36** IMRY, Y. *Introduction to mesoscopic physics*. Oxford: Oxford University Press, 1997. (Mesoscopic Physics and Nanotechnology, 2).
- 37** BÜTTIKER, M. Scattering theory of current and intensity noise correlations in conductors and wave guides. *Physical Review B*, v.46, p.12485–12507, Nov. 1992.
- 38** ROBERTS, B. W. *Kramers degeneracy without eigenvectors*. Disponível em: <<http://arxiv.org/pdf/1208.3889v1.pdf>>. Acesso em: 23 out. 2012.
- 39** BLANTER, Ya. M.; BÜTTIKER, M. Shot noise in mesoscopic conductors. *Physics Reports*, v.336, n.1–2, p.1–166, 2000.
- 40** GRIFFITHS, D. J. *Introduction to quantum mechanics*. New York: Pearson Prentice Hall, 2005. p.50–59.
- 41** ARFKEN, G. B.; WEBER, H. J. *Mathematical methods for physicists*. Burlington: Harcourt/Academic Press, 2003. p.378–379.
- 42** EGUES, J. C. *Espalhamento assistido por fônons: alguns modelos exatamente solúveis*. 1990. 80p. (Mestrado em Física Aplicada) – Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 1990.

43 ARFKEN, G. B.; WEBER, H. J. *Mathematical methods for physicists*. Burlington: Harcourt/Academic Press, 2003. p.168–171.

44 BEARDON, A. F. Worpitzky's theorem on continued fractions. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, v.131, n.1–2, p.143–148, June 2001.

Apêndice

Na Seção 3.5, mostramos o cálculo para se obter o perfil de Fano²⁵ da probabilidade de transmissão elástica $T^{0 \rightarrow 0}$, Eq.(3.53). Aqui faremos cálculo semelhante, porém para a probabilidade de transmissão elástica $T^{1 \rightarrow 1}$, em que o oscilador harmônico está inicialmente em seu primeiro estado excitado, $J = 1$. Neste caso, a Eq.(3.38) se torna

$$T^{1 \rightarrow 1} = T_0^{1 \rightarrow 1} \left| 1 + \frac{\gamma\sqrt{2}}{ik_1 \frac{\hbar^2}{mb}} a_{1 \rightarrow 2} + \frac{\gamma}{ik_1 \frac{\hbar^2}{mb}} a_{1 \rightarrow 0} \right|^2, \quad T_0^{1 \rightarrow 1} \equiv \frac{k_1^2 \left(\frac{\hbar^2}{mb} \right)^2}{\left| ik_1 \frac{\hbar^2}{mb} - \mu \right|^2}. \quad (1)$$

Partindo da Eq.(3.16) e supondo $a_{1 \rightarrow 4} = 0$, montamos um sistema de 4 equações, para $j = 0, 1, 2$ e 3 . Resolvendo este sistema nas variáveis $a_{1 \rightarrow 0}$, $a_{1 \rightarrow 1}$, $a_{1 \rightarrow 2}$ e $a_{1 \rightarrow 3}$, obtemos

$$a_{1 \rightarrow 2} = \frac{\gamma ik_1 \frac{\hbar^2}{mb} \sqrt{2}}{\left[-\mu + ik_1 \frac{\hbar^2}{mb} - \frac{\gamma^2}{ik_0 \frac{\hbar^2}{mb} - \mu} \right] \left[-\mu + ik_2 \frac{\hbar^2}{mb} - \frac{3\gamma^2}{ik_3 \frac{\hbar^2}{mb} - \mu} \right] - 2\gamma^2} \quad (2)$$

e

$$a_{1 \rightarrow 0} = \frac{1}{\frac{1}{\gamma} \left(-\mu + ik_0 \frac{\hbar^2}{mb} \right)} \frac{ik_1 \frac{\hbar^2}{mb} + \gamma\sqrt{2}a_{1 \rightarrow 2}}{\left[-\mu + ik_1 \frac{\hbar^2}{mb} - \frac{\gamma^2}{ik_0 \frac{\hbar^2}{mb} - \mu} \right]}. \quad (3)$$

Para uma energia de incidência particular, $\varepsilon'_2 \approx \varepsilon_1 = -\frac{m(b\mu)^2}{2\hbar^2} + \hbar\omega$, podemos ter

$$-\mu + ik_2(\varepsilon'_2) \frac{\hbar^2}{mb} - \frac{3\gamma^2}{ik_3(\varepsilon'_2) \frac{\hbar^2}{mb} - \mu} = 0. \quad (4)$$

Consideraremos que possamos fazer a aproximação

$$\frac{3\gamma^2}{ik_3(\varepsilon'_2) \frac{\hbar^2}{mb} - \mu} \approx \frac{3\gamma^2}{ik_3(\varepsilon_2) \frac{\hbar^2}{mb} - \mu}, \quad (5)$$

no lado esquerdo da Eq.(4); já que estamos desprezando ordens de γ maiores que 2. Desta forma podemos resolver esta equação aproximada na variável ε'_2 , utilizando k_2 e k_3 como dados pela Eq.(3.7), com $J = 1$:

$$\varepsilon'_2 \approx \hbar\omega - \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{mb}{\hbar^2} \right)^2 \left[-\mu + \frac{3\gamma^2}{\frac{\hbar^2}{mb} \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} \left(\frac{m(b\mu)^2}{2\hbar^2} \right)} + \mu} \right]^2. \quad (6)$$

Assim, ε'_2 pode ser escrito em termos de $\varepsilon_1 = E_{\text{bound}} + \hbar\omega$:

$$\varepsilon'_2 \approx \varepsilon_1 + \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{mb}{\hbar^2} \right)^2 \frac{6\mu\gamma^2}{\frac{\hbar^2}{mb} \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} \left(\frac{m(b\mu)^2}{2\hbar^2} \right)} + \mu} + O(\gamma^4). \quad (7)$$

Expandiremos em série de Taylor o lado esquerdo da Eq.(4) em torno de ε'_2 , até primeira ordem em $(\varepsilon_x - \varepsilon'_2)$:

$$-\mu + ik_2 \frac{\hbar^2}{mb} - \frac{3\gamma^2}{ik_3 \frac{\hbar^2}{mb} - \mu} \approx \beta(\varepsilon'_2)(\varepsilon_x - \varepsilon'_2), \quad (8)$$

em que

$$\begin{aligned} \beta(\varepsilon'_2) &= \frac{d}{d\varepsilon_x} \left[ik_2 \frac{\hbar^2}{mb} - \frac{3\gamma^2}{ik_3 \frac{\hbar^2}{mb} - \mu} \right] \Big|_{\varepsilon_x = \varepsilon'_2} \\ &= \left(\frac{\hbar^2}{mb} \right)^2 \frac{2m}{\hbar^2} \frac{1}{2|\mu|} + O(\gamma^2). \end{aligned} \quad (9)$$

Fazendo as seguintes definições,

$$A \equiv \frac{\gamma ik_1 \frac{\hbar^2}{mb} \sqrt{2}}{\beta(\varepsilon'_2) \left[\left(ik_1 \frac{\hbar^2}{mb} - \mu \right) - \frac{\gamma^2}{ik_0 \frac{\hbar^2}{mb} - \mu} \right]}, \quad (10)$$

$$\varepsilon_r \equiv \varepsilon'_2 - \frac{2\gamma^2}{\beta(\varepsilon'_2)} \frac{\mu \left[1 + \frac{\gamma^2}{\left(k_0 \frac{\hbar^2}{mb} \right)^2 + \mu^2} \right]}{\left[k_1 \frac{\hbar^2}{mb} - \frac{\gamma^2 k_0 \frac{\hbar^2}{mb}}{\left(k_0 \frac{\hbar^2}{mb} \right)^2 + \mu^2} \right]^2 + \mu^2 \left[1 + \frac{\gamma^2}{\left(k_0 \frac{\hbar^2}{mb} \right)^2 + \mu^2} \right]^2} \quad (11)$$

e

$$\Gamma \equiv \frac{4\gamma^2}{\beta(\varepsilon'_2)} \frac{\frac{\gamma^2 k_0 \frac{\hbar^2}{mb}}{\left(k_0 \frac{\hbar^2}{mb} \right)^2 + \mu^2} - k_1 \frac{\hbar^2}{mb}}{\left[k_1 \frac{\hbar^2}{mb} - \frac{\gamma^2 k_0 \frac{\hbar^2}{mb}}{\left(k_0 \frac{\hbar^2}{mb} \right)^2 + \mu^2} \right]^2 + \mu^2 \left[1 + \frac{\gamma^2}{\left(k_0 \frac{\hbar^2}{mb} \right)^2 + \mu^2} \right]^2}; \quad (12)$$

podemos escrever a amplitude $a_{1 \rightarrow 2}$ na forma de Breit-Wigner:

$$a_{1 \rightarrow 2} = \frac{A}{(\varepsilon_x - \varepsilon_r) + i \frac{\Gamma}{2}} \quad (13)$$

e $a_{1 \rightarrow 0}$ na forma

$$a_{1 \rightarrow 0} = A_0 + \frac{A'}{(\varepsilon_x - \varepsilon_r) + i \frac{\Gamma}{2}}, \quad (14)$$

com

$$A' \equiv A \frac{1}{(ik_0 \frac{\hbar^2}{mb} - \mu)} \frac{\gamma^2 \sqrt{2}}{\left[(ik_1 \frac{\hbar^2}{mb} - \mu) - \frac{\gamma^2}{ik_0 \frac{\hbar^2}{mb} - \gamma} \right]} \quad (15)$$

e

$$A_0 \equiv \frac{1}{(ik_0 \frac{\hbar^2}{mb} - \mu)} \frac{\gamma ik_1 \frac{\hbar^2}{mb}}{\left[(ik_1 \frac{\hbar^2}{mb} - \mu) - \frac{\gamma^2}{ik_0 \frac{\hbar^2}{mb} - \gamma} \right]}. \quad (16)$$

Finalmente, a Eq.(1) se torna

$$\frac{T^{1 \rightarrow 1}}{T_0^{1 \rightarrow 1}} = \left| 1 + A_0 + \frac{A + A'}{(\varepsilon_x - \varepsilon_r) + i \frac{\Gamma}{2}} \right|^2, \quad (17)$$

que corresponde à interferência entre o termo ressonante carregando $A + A'$, na forma de Breit-Wigner, e um termo não-ressonante $1 + A_0$. Isto pode ser reescrito como

$$\frac{T^{1 \rightarrow 1}}{T_0^{1 \rightarrow 1}} = |1 + A_0|^2 \left[\frac{(\epsilon + q)^2}{\epsilon^2 + 1} + \frac{p^2}{\epsilon^2 + 1} \right], \quad (18)$$

em que

$$\epsilon \equiv \frac{2(\varepsilon_x - \varepsilon_r)}{\Gamma}, \quad (19)$$

$$q \equiv \text{Re} \left\{ \frac{A + A'}{1 + A_0} \frac{2}{\Gamma} \right\} \quad (20)$$

e

$$p \equiv \text{Im} \left\{ i + \frac{A + A'}{1 + A_0} \frac{2}{\Gamma} \right\} = 1 + \text{Im} \left\{ \frac{A + A'}{1 + A_0} \frac{2}{\Gamma} \right\}. \quad (21)$$