

## 4 Resultados numéricos. Análise e discussões

Este capítulo é dedicado à apresentação e discussão dos resultados numéricos obtidos com base no desenvolvimento teórico que apresentamos nos capítulos anteriores. A primeira seção é dedicada aos resultados de equilíbrio, onde apresentamos um rápido estudo das curvas das DOS's e das cargas nos PQ's, obtidas para as configurações em série e em paralelo. Os resultados para o sistema fora do equilíbrio começam a ser abordados já na segunda seção, onde detalhamos o processo de carga e o comportamento da corrente num sistema mais simples, de um único PQ. Este cálculo tem como objetivo comprovar que a teoria desenvolvida se reduz ao resultado conhecido de um sistema de um PQ<sup>28</sup>. Na terceira seção discutimos os resultados fora de equilíbrio para dois PQ's associados em paralelo, e na quarta, para dois PQ's associados em série.

### 4.1 Densidade de estados e carga eletrônica para o sistema de PQ's em equilíbrio termodinâmico. Associações em série e em paralelo

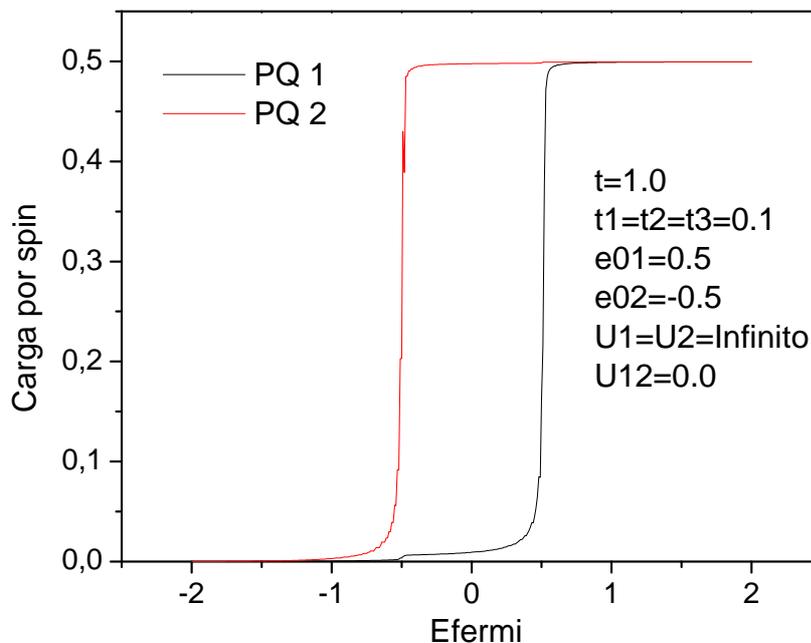


Figura 4.1: Carga eletrônica em função do nível de Fermi para os PQ's não correlacionados e associados em série. Os PQ's se carregam nas autoenergias  $\epsilon_1 = 0.5$  e  $\epsilon_2 = -0.5$ , referentes aos PQ's 1 (linha preta) e 2 (linha vermelha), respectivamente.

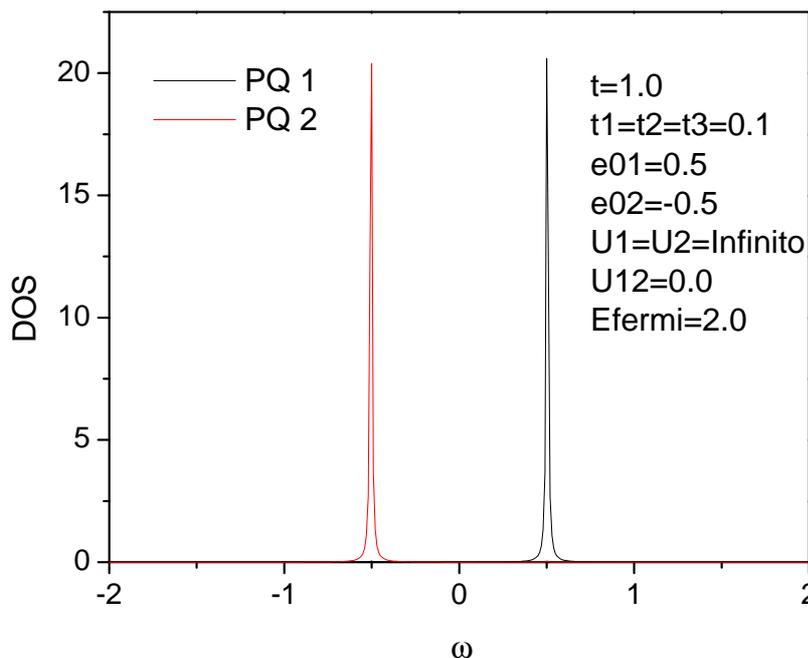


Figura 4.2: DOS para os PQ's não correlacionados e associados em série. Os picos ocorrem justamente nas autoenergias  $\epsilon_1 = 0.5$  e  $\epsilon_2 = -0.5$ , referentes aos PQ's 1 (linha preta) e 2 (linha vermelha), respectivamente.

Nesta seção apresentaremos os resultados autoconsistentes obtidos para a carga e para a DOS nas configurações de PQ's descritas no segundo capítulo (figuras (2.1) e (2.2)). Na obtenção destes resultados consideramos um regime no qual as interações coulombianas  $U_i$  nos PQ's são infinitas. Quanto às interações  $U_{12}$  entre os PQ's consideramos duas situações: uma na qual esta interação é nula e outra na qual também é infinita.

Nos dois primeiros gráficos, mostrados nas figuras (4.1) e (4.2), temos, respectivamente, as curvas para a carga e para a DOS no sistema de PQ's em série (figura (2.2)). Consideramos as autoenergias nos reservatórios,  $\epsilon_L$  e  $\epsilon_R$ , inicialmente em zero de modo que, com o termo de hopping escolhido  $t = 1.0$ , as bandas de energia da esquerda e da direita tenham uma largura de quatro unidades de energia, começando em  $-2.0$ , centrada em  $0.0$ , e terminando em  $2.0$ . O nível de Fermi nos reservatórios é feito variar desde o fundo da banda (em  $-2.0$ ) até seu topo (em  $2.0$ ). Os resultados mostram que, quando o nível de Fermi nos reservatórios alcançam a autoenergia  $\epsilon_i$  ( $i = 1, 2$ ) nos PQ's, escolhidas  $\epsilon_1 = 0.5$  e  $\epsilon_2 = -0.5$ , a DOS cresce abruptamente (figura (4.2)) e o PQ se carrega (figura (4.1)). Como, neste caso, não consideramos a interação entre os PQ's, o processo de carga em cada um deles se dá de forma independente. Quando trabalhamos com a situação limite em que  $U_1$  e  $U_2$  são infinitas, não podemos ter mais do que um único elétron em cada PQ e, como mostra a figura (4.1), a carga por spin se estabiliza em  $0.5$ . Quando a interação  $U_{12}$  deixa de ser nula, o processo de carga deixa de

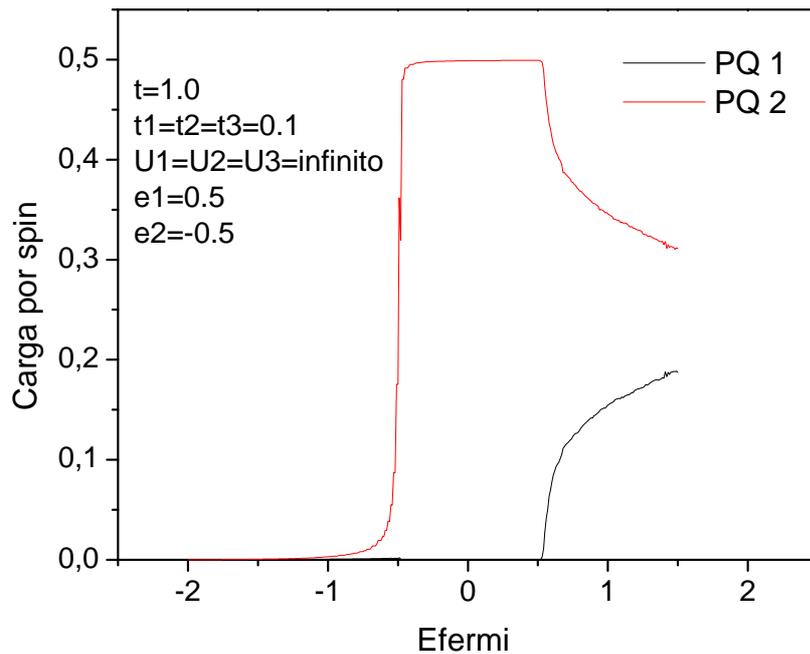


Figura 4.3: Carga eletrônica em função do nível de Fermi para os PQ's fortemente correlacionados e associados em série. Os PQ's se carregam nas autoenergias  $\epsilon_1 = 0.5$  e  $\epsilon_2 = -0.5$ , referentes aos PQ's 1(linha preta) e 2(linha vermelha), respectivamente.

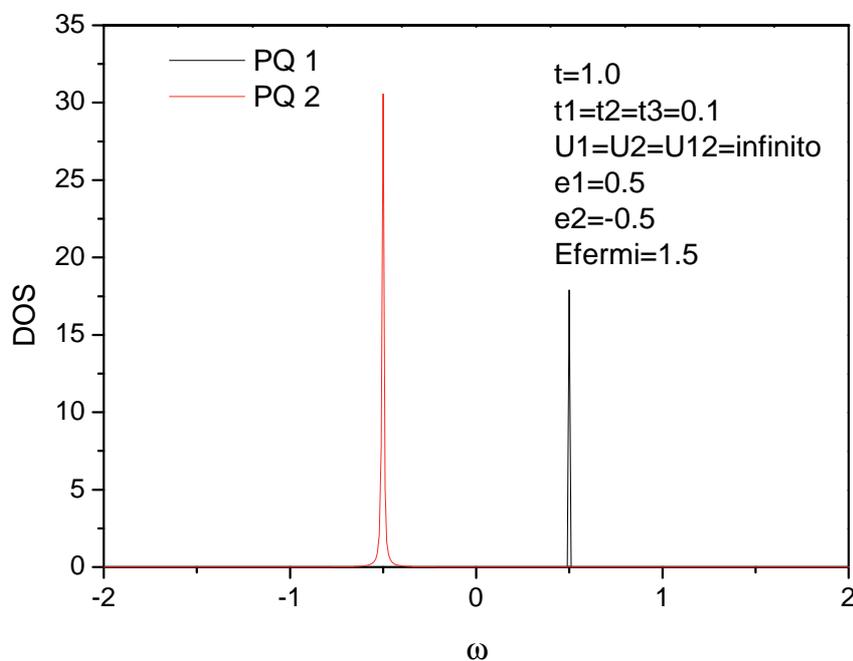


Figura 4.4: DOS para os PQ's fortemente correlacionados e associados em série. Os picos ocorrem justamente nas autoenergias  $\epsilon_1 = 0.5$  e  $\epsilon_2 = -0.5$ , referentes aos PQ's 1(linha preta) e 2(linha vermelha), respectivamente.

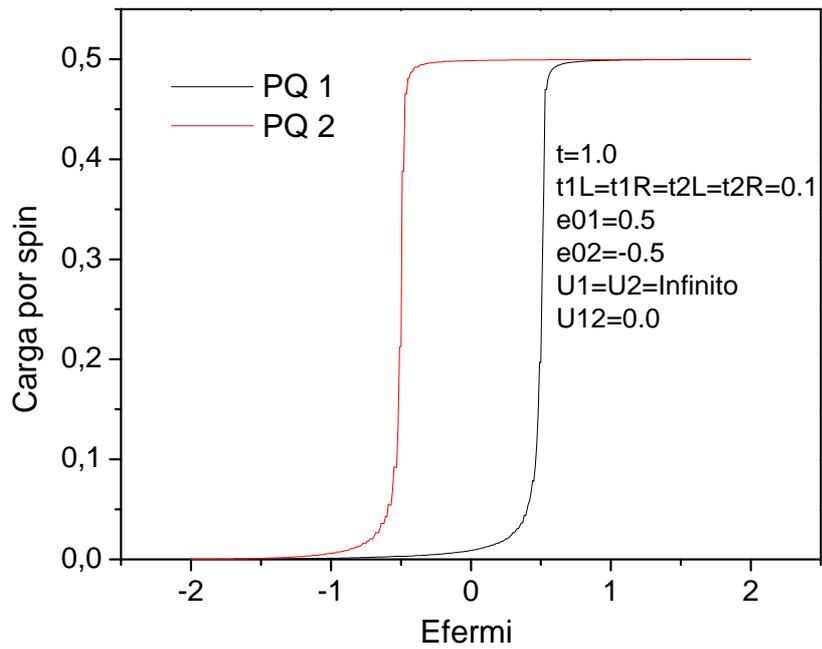


Figura 4.5: Carga eletrônica em função do nível de Fermi para os PQ's não correlacionados e associados em paralelo. Os PQ's se carregam nas autoenergias  $\epsilon_1 = 0.5$  e  $\epsilon_2 = -0.5$ , referentes aos PQ's 1(linha preta) e 2(linha vermelha), respectivamente.

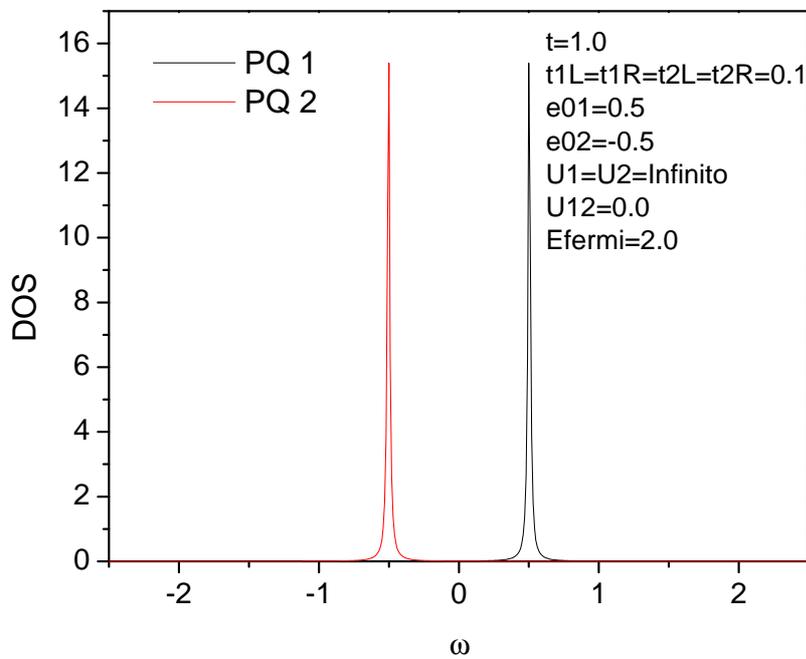


Figura 4.6: DOS para os PQ's não correlacionados e associados em paralelo. Os picos ocorrem justamente nas autoenergias  $\epsilon_1 = 0.5$  e  $\epsilon_2 = -0.5$ , referentes aos PQ's 1(linha preta) e 2(linha vermelha), respectivamente.

ser independente. No limite em que esta interação se torna muito grande a energia necessária para que mais de um elétron seja adicionado no sistema se torna infinita e os dois PQ's passam a compartilhar um único elétron. De fato, analisando o resultado da figura (4.3) observamos que, durante todo o processo pelo qual o sistema vai sendo carregado, a soma das cargas nos PQ's é menor do que 0.5 e que, na faixa de energia em que os dois níveis  $\epsilon_1$  e  $\epsilon_2$  se encontram por baixo do nível de Fermi dos reservatórios, a entrada de carga num destes PQ's está diretamente relacionada com o escoamento de cargas do outro. Na figura (4.4) mostramos o resultado que obtivemos para as DOS do sistema, que é similar ao obtido para o caso em que  $U_{12} = 0$ . Destacamos neste resultado a dependência entre a largura das curvas obtidas e a quantidade de carga nos PQ's. No caso, a curva da DOS no PQ com mais carga (linha preta) se mostra mais larga do que a obtida para o PQ com menos carga (linha vermelha). Esta dependência está associada ao peso estatístico de cada termo do somatório  $\sum_{\alpha\beta\gamma} G_{ii\sigma}^{\alpha\beta\gamma}$ . Termos com polos bem localizados  $\omega = \epsilon_i$ , que contribuem para uma DOS mais estreita, tem peso  $1 - n_i$  e são tanto maiores quanto menos carga existir no PQ. Por outro lado, termos não tão localizados como, por exemplo, o de polo em  $\omega = \epsilon_i + U_1 + 2U_{12}$ , obtido para  $\alpha = \beta = \gamma = 1$  e que contribuem para uma DOS mais larga, tem peso  $n_i$  e aumentam com a quantidade de carga no PQ.

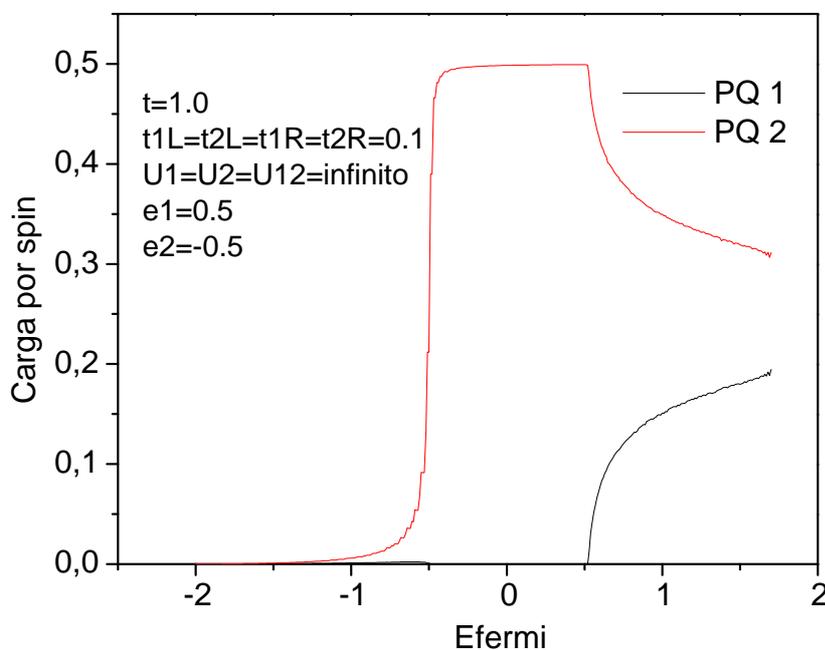


Figura 4.7: Carga eletrônica em função do nível de Fermi para os PQ's fortemente correlacionados e associados em paralelo. Os PQ's se carregam nas autoenergias  $\epsilon_1 = 0.5$  e  $\epsilon_2 = -0.5$ , referentes aos PQ's 1 (linha preta) e 2 (linha vermelha), respectivamente.

Os resultados, com os mesmos parâmetros, obtidos para os PQ's associados em paralelo são mostrados nas figuras (4.5), (4.6), (4.7) e (4.8), e

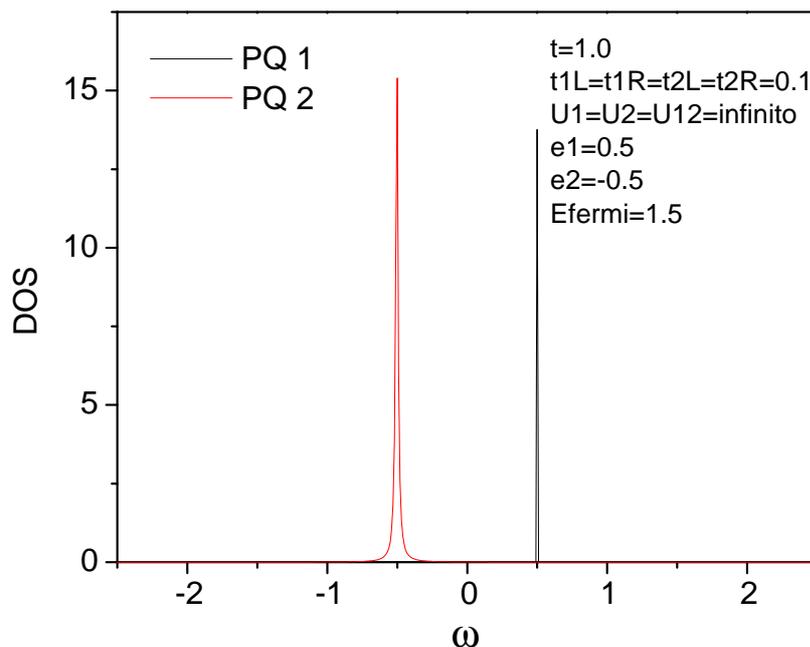


Figura 4.8: DOS para os PQ's fortemente correlacionados e associados em paralelo. Os picos ocorrem justamente nas autoenergias  $\epsilon_1 = 0.5$  e  $\epsilon_2 = -0.5$ , referentes aos PQ's 1 (linha preta) e 2 (linha vermelha), respectivamente.

não diferem muito dos obtidos para a associação em série. Destes e dos resultados obtidos para a configuração em série observamos que, para o sistema em equilíbrio, as diferenças topológicas se manifestam basicamente nas DOS. De fato, analisando os resultados das DOS obtidos para as duas topologias, observamos que, com os PQ's em série, maior é o número de estados associados ao processo de carga nos PQ's, de modo que, com os PQ's associados desta maneira, estes se carregam com mais facilidade do que se estivessem associados em paralelo.

## 4.2 Carga eletrônica e corrente num PQ na presença de um potencial externo.

Nesta seção descrevemos os resultados obtidos para a carga eletrônica e para a corrente no sistema de um único PQ conectado à dois reservatórios de elétrons<sup>a</sup> na presença de um potencial externo  $V$ .

Embora conhecido<sup>28</sup>, o estudo do problema de um único PQ é interessante como forma de comparar nossos resultados e ganhar confiança na teoria desenvolvida para 2 PQ's. Na obtenção deste resultado o nível de Fermi do reservatório da direita vai variando de modo que o potencial externo  $V$  corresponde a  $\mu_R - \mu_L$ , sendo  $\mu_L$  e  $\mu_R$  os níveis de Fermi dos reservatórios da esquerda e da direita, respectivamente. Devido à aplicação

<sup>a</sup>Este sistema pode ser facilmente obtido se ajustarmos os parâmetros de tal modo que um dos PQ's constituinte do sistema original de dois PQ's seja anulado.

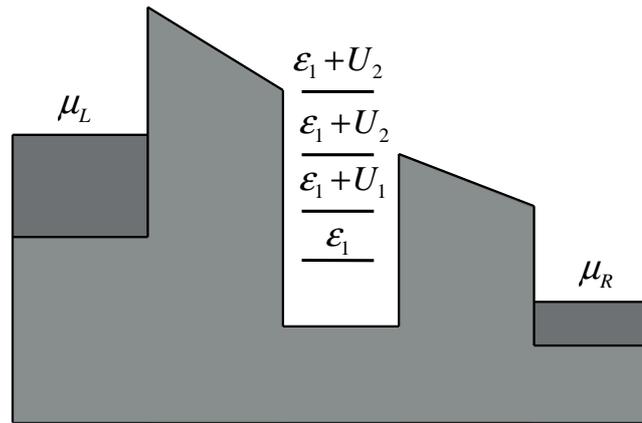


Figura 4.9: Perfil de energia para o sistema de um PQ mostrando a posição dos níveis  $\epsilon_1 + U_1$ ,  $\epsilon_1 + U_2$ ,  $\epsilon_1 + U_3$  com relação aos níveis de Fermi dos reservatórios.

do potencial externo o sistema se encontra fora do equilíbrio termodinâmico. As figuras (4.10) e (4.11) mostram, respectivamente, os resultados obtidos

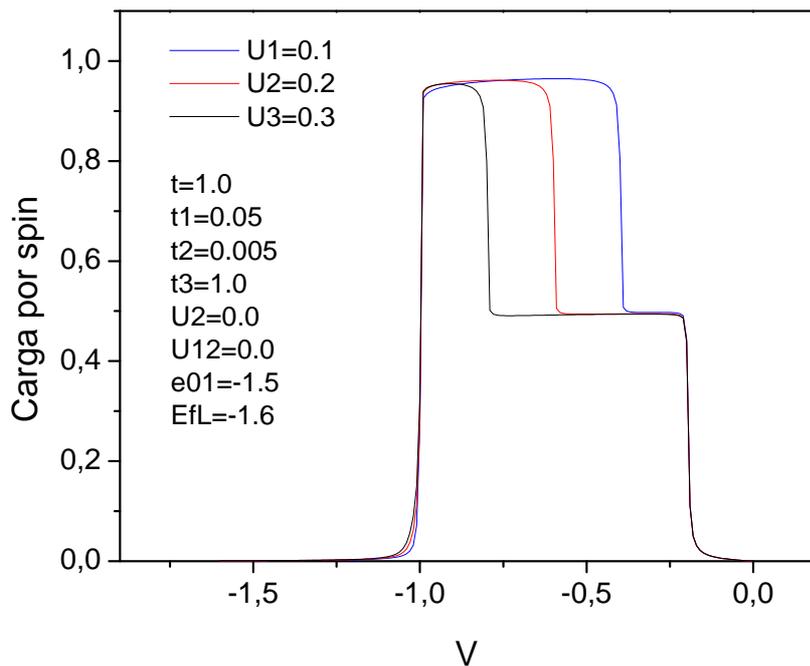


Figura 4.10: Carga eletrônica no interior de um PQ em função do potencial externo aplicado.

para a carga e para a corrente elétrica calculadas em função deste potencial para três valores diferentes da interação coulombiana  $U$  no PQ, a saber,  $U = 0.1$ ,  $U = 0.2$  e  $U = 0.3$ .

O sistema é preparado de forma que inicialmente  $\mu_L$  e  $\mu_R$  estejam alinhados no fundo da banda, no caso em  $-1.6$ . O nível  $\epsilon$  do PQ é colocado inicialmente em  $-1.5$ , pouco acima dos níveis de Fermi dos reservatórios.  $\mu_L$  é considerado fixo em  $-1.6$  e  $\mu_R$ , inicialmente em  $-1.6$ , é levado até  $-3.2$ . A

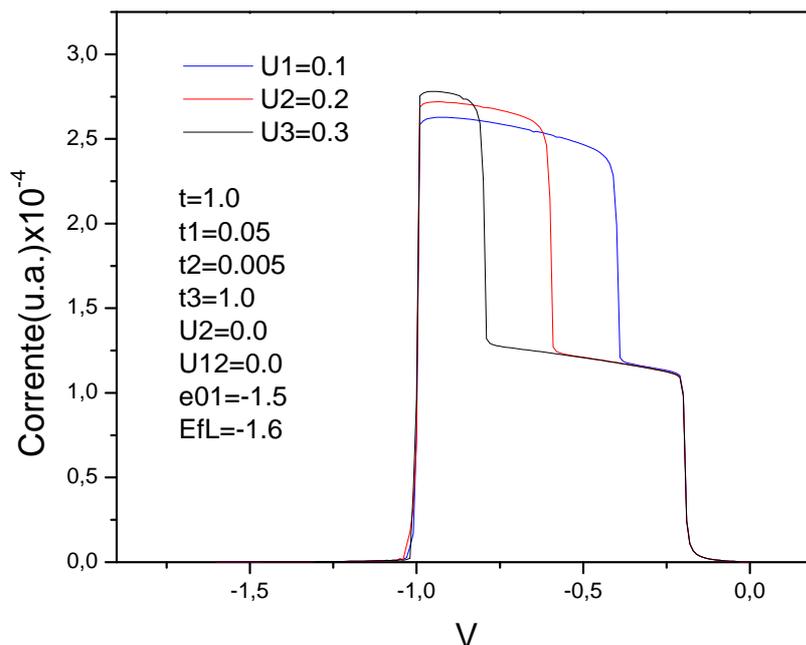


Figura 4.11: Corrente elétrica no sistema de um PQ em função do potencial externo aplicado.

medida que  $\mu_R$  vai sendo reduzido, o nível  $\epsilon$  no PQ vai diminuindo segundo a relação (1.3). Logo no início do processo, quando o nível  $\epsilon$  atinge  $-1.6$  e começa a penetrar na região por baixo de  $\mu_L$ , elétrons provenientes deste reservatório passam a ocupar este nível (com menos de um elétron na média como resultado da repulsão coulombiana) e a tunelar pelo sistema, o que acarreta num primeiro processo de carga do PQ e a conseqüente aparição de uma corrente elétrica. Num segundo momento, quando a diferença de energia entre  $\epsilon$  e  $\mu_L$  se torna maior do que  $U$ , elétrons do reservatório da esquerda passam a ocupar também o estado de energia  $\epsilon + U$  e a tunelar para o reservatório da direita, o que corresponde a um segundo processo de carga do PQ, que passa a ter dois elétrons, e a um novo aumento no valor da corrente, como mostram, respectivamente, os resultados das figuras (4.10) e (4.11) para  $U=0.1$ ,  $U=0.2$  e  $U=0.3$ . Aumentando o potencial aplicado, o PQ segue com seus dois níveis ocupados até que  $\epsilon$  passa pela base do reservatório da esquerda, considerada fixa em  $-2.0$ . A partir desta região os estados localizados não estão mais alinhados com uma região de estados ocupados e a carga no PQ, assim como a corrente no sistema, caem bruscamente a zero. Este comportamento da corrente é esperado, já que está de acordo com resultados experimentais e teóricos<sup>29</sup>.

### 4.3 Carga eletrônica e corrente num sistema de dois PQ's fora do equilíbrio termodinâmico. Associação em paralelo.

Nesta seção abordaremos o estudo da carga eletrônica e da corrente de um sistema de dois PQ's conectados paralelamente à dois reservatórios de elétrons (figura 2.1). Nesta abordagem vamos considerar tanto os casos em que as repulsões coulombianas locais  $U_1$  e  $U_2$  são infinitas e os elétrons estão fortemente correlacionados nos PQ's como o caso em que estas interações assumem valores finitos.

Para o caso mais simples em que  $U_1 = U_2 = \infty$  apresentaremos dois resultados que nos permitem entender qualitativamente o papel das interações coulombianas no interior e entre os PQ's. Em um caso a interação  $U_{12}$  entre os PQ's é nula e no outro é infinita.

Na figura (4.12) representamos para o primeiro caso a carga de cada PQ (linha contínua) e a corrente (linha pontilhada) em função da diferença de potencial  $V$ . Nesta situação os PQ's se carregam de forma independente. Os níveis de energias  $\epsilon_1$  e  $\epsilon_2$  são supostos diferentes para representar a situação mais geral possível. Em forma arbitrária são colocados inicialmente em  $-1.3$  e  $-1.5$ , respectivamente. Com  $\mu_L$  fixo em  $-1.6$ , o nível de Fermi  $\mu_R$  do reservatório da direita, inicialmente com este valor, desloca-se para baixo pela atuação do potencial externo sobre o sistema. Durante a descida de  $\mu_R$  os níveis  $\epsilon_1$  e  $\epsilon_2$  também se deslocam para baixo de acordo com as relações (1.4) e (1.5), respectivamente. Logo no início deste processo, quando  $V = -0.2$ , o nível  $\epsilon_2$  atinge o valor de  $\mu_L$  e o PQ 2 é rapidamente carregado. Em conseqüência, o sistema passa a ser percorrido por uma corrente elétrica que circula através do braço que contém o PQ 2. Em  $V = -0.6$  é o nível  $\epsilon_1$  que atinge este valor e o PQ 1 também é ocupado. Com os dois PQ's carregados, e a presença de mais um canal de tunelamento, a corrente que atravessa o dispositivo tem seu valor bruscamente aumentado. No caso específico do resultado da figura (4.11), onde existe simetria entre os dois braços do circuito, as correntes circulantes interferem construtivamente e o resultado é uma corrente maior. No caso dos braços serem diferentes as correntes podem ter interferências parcialmente destrutivas e eventualmente se cancelar. Aumentando o potencial externo aplicado o sistema permanece com seus dois PQ's carregados até  $V = -1.0$ , quando  $\epsilon_2$  passa pela base de condução do reservatório da esquerda e o PQ 2 é descarregado. Com a descarga deste PQ e o conseqüente desaparecimento de um dos dois canais de tunelamento, a corrente no dispositivo cai. Em  $V = -1.4$  o nível  $\epsilon_1$  também passa pela base deste reservatório e a carga no PQ 1, assim como a corrente no dispositivo, vão rapidamente a zero. A carga e a corrente possuem uma

estrutura típica de "plateau"<sup>28</sup>.

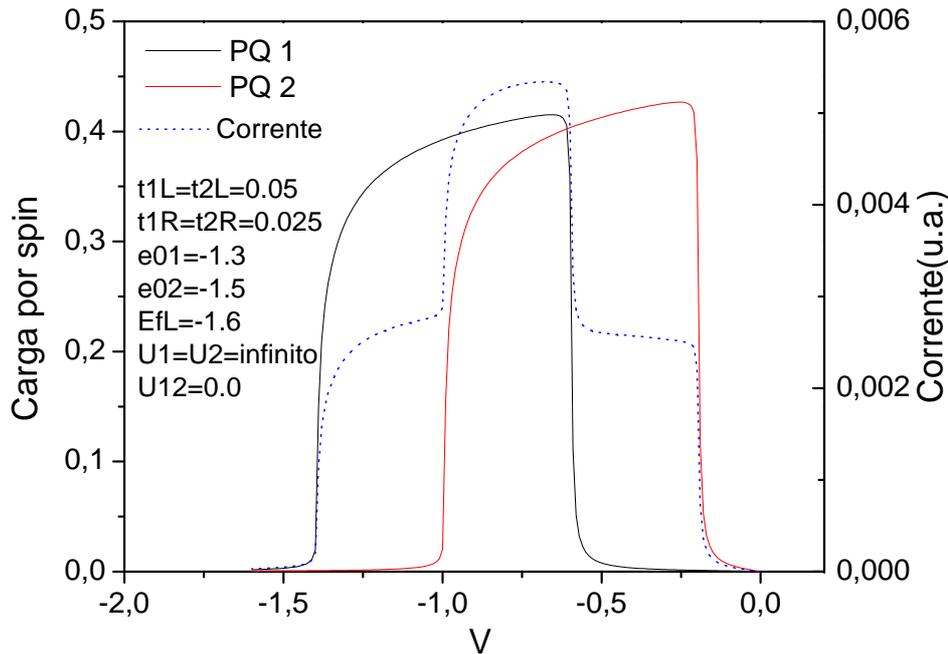


Figura 4.12: Carga e corrente em função de  $V$  num sistema de dois PQ's associados em paralelo e fora do equilíbrio termodinâmico. Interação Coulombiana infinita no interior dos PQ's e zero entre estes.

Agora estudamos o segundo caso a que nos referimos acima, para o qual a interação  $U_{12}$  também é infinita. Para a obtenção dos resultados (figura(4.13)) o sistema foi preparado exatamente como no caso anterior. Acompanhando a diminuição de  $\mu_R$ , os níveis  $\epsilon_1$  e  $\epsilon_2$  movimentam-se para baixo. A exemplo do que acontece no caso anterior, o PQ 2 se carrega em  $V = -0.2$  e o PQ 1 em  $V = -0.6$ , justamente quando  $\epsilon_2$  e  $\epsilon_1$ , respectivamente, passam por  $\mu_L$ . Em  $V = -0.2$ , com o PQ 1 descarregado, o PQ 2 se carrega como no caso anterior em que  $U_{12} = 0$ , abrindo um canal para o tunelamento eletrônico entre os reservatórios e gerando uma corrente elétrica que atravessa o sistema. Quando  $\epsilon_1 = -1.6$  e o PQ 1 começa a se carregar o PQ 2 já está carregado. Devido a forte correlação entre estes PQ's, o processo de carga no PQ 1, além de dificultado por esta interação, é acompanhado por um forte processo de descarga do PQ 2, cuja carga cai rapidamente pela metade e vai diminuindo de forma mais gradativa à medida que o PQ 1 vai sendo carregado, até ir a zero quando  $\epsilon_2$  passa pela base do reservatório da esquerda. A abertura do canal correspondente ao PQ 1 é acompanhada de um aumento da corrente ( $\epsilon_1 < -1.6$ ), que sofre uma diminuição quando o canal do PQ 2 é fechado ( $\epsilon_2 < -2.0$ ). Com o PQ 2 descarregado o PQ 1 mantém sua carga até a passagem de  $\epsilon_1$  pela base do reservatório da esquerda, região em que este PQ é descarregado e a corrente no sistema vai a zero.

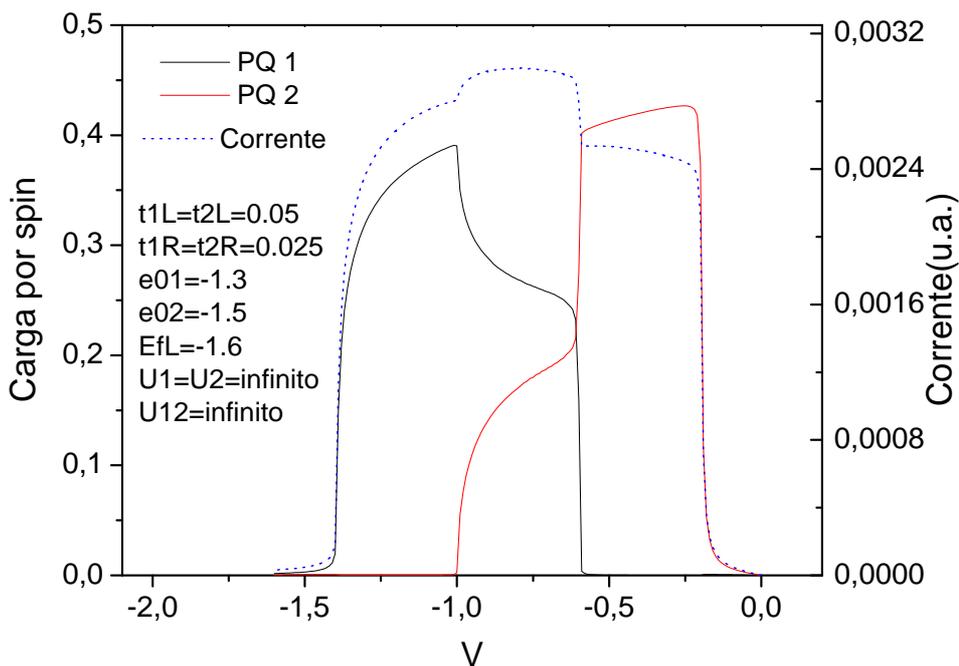


Figura 4.13: Carga e corrente em função de V num sistema de dois PQ's associados em paralelo e fora do equilíbrio termodinâmico. Interação Coulombiana infinita no interior e entre os PQ's.

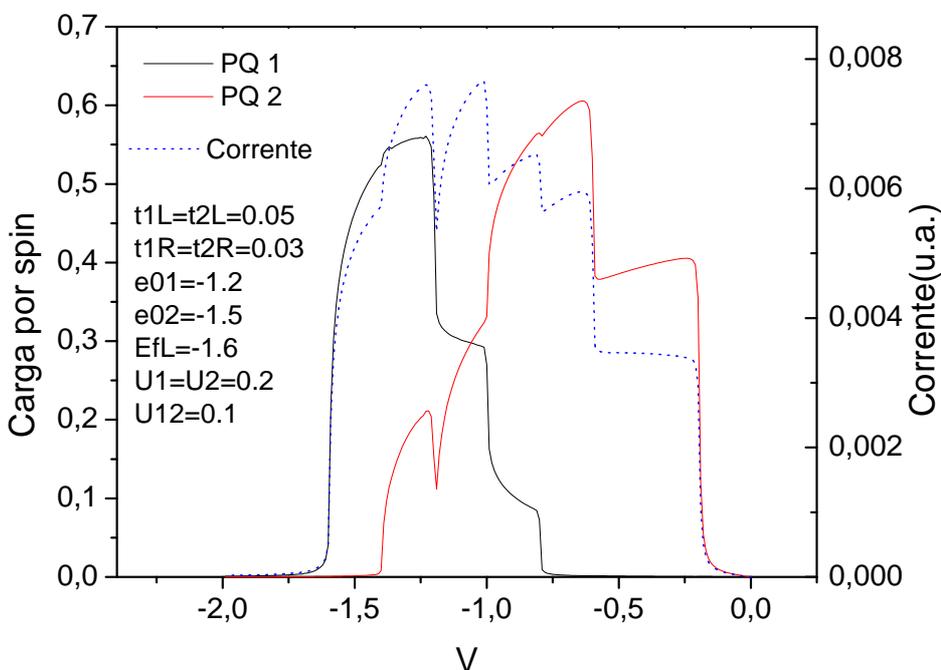


Figura 4.14: Carga e corrente em função de V num sistema de dois PQ's associados em paralelo e fora do equilíbrio termodinâmico. Interação Coulombiana finita no interior e entre os PQ's.

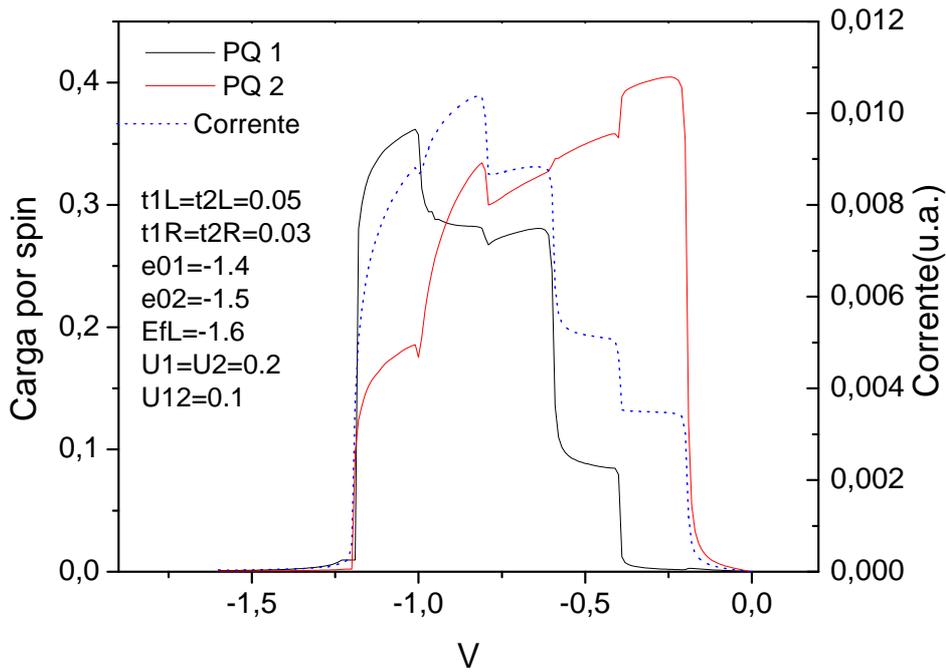


Figura 4.15: Carga e corrente em função de  $V$  num sistema de dois PQ's associados em paralelo e fora do equilíbrio termodinâmico. Interação coulombiana finita no interior e entre os PQ's. O valor inicial de  $\epsilon_1$  é diferente ao correspondente da figura (4.13).

Nos dois resultados que discutimos no parágrafo anterior a repulsão eletrônica infinita ( $U_1 = U_2 = U_{12}$ ) restringe o processo de carga de forma que a soma das cargas dos dois PQ's,  $n_T$ , satisfaz  $n_T < 1$ . Quando  $U_1$ ,  $U_2$  e  $U_{12}$  assumem valores finitos (algumas vezes menores do que o nível de Fermi), alguns dos níveis, por exemplo,  $\epsilon_1 + U_1$  e  $\epsilon_1 + U_1 + U_{12}$  no caso do PQ 1 e  $\epsilon_2 + U_2$  e  $\epsilon_2 + U_2 + U_{12}$  no caso PQ 2, além de outros, penetram na região por abaixo de  $\mu_L$  e o processo de carga (e descarga) é um pouco mais complexo. As figuras (4.13) e (4.14) mostram dois resultados para esta situação, ambos obtidos com  $U_1 = U_2 = 0.2$  e  $U_{12} = 0.1$ . A partir destes resultados vamos tentar entender como a presença de carga num dado PQ pode influenciar na ocupação do outro e quais as consequências disso na corrente que percorre o sistema. Nos dois resultados consideramos, como anteriormente,  $\mu_L$  fixo em  $-1.6$  e  $\mu_R$ , inicialmente com este valor, levado à  $-3.2$  pelo potencial externo. Junto com  $\mu_R$  os níveis  $\epsilon_1$  e  $\epsilon_2$ , inicialmente por cima de  $\mu_L$ , caem segundo as relações (1.4) e (1.5) e penetram na região por baixo de  $\mu_L$ , onde os PQ's são carregados.

Começaremos por analisar o resultado da figura (4.13). Na obtenção deste resultado tomamos para  $\epsilon_1$  e  $\epsilon_2$  inicialmente os valores  $-1.2$  e  $-1.5$ , respectivamente. Quando  $V = -0.2$  o nível  $\epsilon_2$  passa por baixo de  $\mu_L$  e o PQ 2 é rapidamente carregado. Em  $V = -0.6$ , com o PQ 1 ainda descarregado, o nível  $\epsilon_2 + U_2$  passa por  $\mu_L$  e a carga no PQ 2 sofre um novo aumento. Os níveis  $\epsilon_2$  e  $\epsilon_2 + U_2$  abrem dois canais pelos quais elétrons do

reservatório da esquerda podem tunelar para o reservatório da direita, o que explica os sucessivos aumentos na corrente que acompanham este aumento da carga(veja a figura). Em  $V = -0.8$ , o nível  $\epsilon_1$  passa por  $\mu_L$  e o PQ 1 começa a se carregar. Com o aumento de sua carga o PQ 1 interage com o PQ 2(já carregado) via  $U_{12}$  e os níveis ainda vazios  $\epsilon_1 + 2U_{12}$ ,  $\epsilon_1 + U_1 + U_{12}$  e  $\epsilon_1 + U_1 + 2U_{12}$  ganham peso estatístico. Isto explica a dificuldade que este PQ tem para se carregar nesta região do potencial externo aplicado. Em  $V = -1.0$  o nível  $\epsilon_1$  está passando pela base da banda e o PQ 2 começa a perder carga. Este processo coincide com a passagem de  $\epsilon_1 + U_{12}$  por  $\mu_L$  e o conseqüente aumento de carga no PQ 1. Ao contrário do que obtivemos para o sistema de um único PQ, a carga no PQ 2 não vai a zero, o que novamente se explica pela presença de carga no outro PQ. De fato, a presença de carga no PQ 1 aumenta a probabilidade associada à ocupação dos níveis  $\epsilon_2 + U_{12}$ ,  $\epsilon_2 + 2U_{12}$ ,  $\epsilon_2 + U_2 + U_{12}$  e  $\epsilon_2 + U_2 + 2U_{12}$  que ainda estão por cima da banda de condução da esquerda. Seguindo o aumento do potencial externo aplicado, estes níveis vão sucessivamente passando pela base da banda e o PQ 2 continua perdendo carga. Em  $V = -1.2$  o nível  $\epsilon_1 + U$  passa por  $\mu_L$  e o PQ 1 volta a se carregar. Este aumento da carga no PQ 1 aumenta a probabilidade associada aos estados dos níveis ocupados referentes ao PQ 2 e a carga neste PQ volta a subir(veja a figura (4.13)). Em  $V = -1.4$ , depois da passagem de  $\epsilon_2 + U_{12}$ ,  $\epsilon_2 + 2U_{12}$  e  $\epsilon_2 + U$  pela base do reservatório da esquerda este PQ se descarrega por completo. Todos estes processos de carga e descarga se refletem no transporte de elétrons pelo sistema, o que se pode notar pelas sucessivas variações da corrente que ocorrem nesta faixa do potencial externo aplicado. Em  $V = -1.6$  o nível  $\epsilon_1$  também passa pela base da banda e, como o outro PQ está vazio, a carga no PQ 1 e a corrente no sistema vão a zero.

Passando agora para o resultado da figura (4.15) temos que, neste caso,  $\epsilon_1$  e  $\epsilon_2$  são considerados inicialmente em  $-1.4$  e  $-1.5$ , respectivamente. A diferença deste para o resultado que acabamos de descrever é que, como  $\epsilon_1$  e  $\epsilon_2$  estão mais próximos, o PQ 1 começa a se carregar com o PQ 2 ainda não completamente cheio, o que também nos permite investigar como a presença de carga no PQ 1 pode influenciar a entrada de carga no PQ 2. Como no caso anterior, em  $V = -0.2$ , quando  $\epsilon_2$  começa a penetrar por baixo de  $\mu_L$ , temos um primeiro processo de carga no PQ 2 e o conseqüente aparecimento de uma corrente elétrica através do sistema. Em  $V = -0.4$ , com o PQ 2 ainda não completamente cheio, o nível  $\epsilon_1$  passa por  $\mu_L$  e o PQ 1 começa a se carregar, o que acarreta um novo aumento na corrente. Para este mesmo valor do potencial externo aplicado o nível  $\epsilon_2 + U_{12}$  do PQ 2 também está passando por  $\mu_L$ , o que disponibiliza mais um nível para a ocupação eletrônica deste

PQ. Como podemos ver na figura, nem esta coincidência é capaz de impedir o escoamento de carga provocado pela interação deste com o PQ 1. Em  $V = -0.6$  temos outra coincidência deste tipo, para este potencial são os níveis  $\epsilon_1 + U_1$  do PQ 1 junto com  $\epsilon_2 + U_2$  e  $\epsilon_2 + 2U_{12}$  do PQ 2 que penetram pela região por baixo de  $\mu_L$ . O resultado mostra que neste valor do potencial aplicado o PQ 1 volta a sofrer um acentuado processo de carga e que, apesar da presença de mais dois níveis para serem ocupados no PQ 2, este ainda sofre uma pequena descarga. Em  $V = -0.8$  o nível  $\epsilon_1 + U_1$  do PQ 1 e o nível  $\epsilon_2 + U_2 + U_{12}$  do PQ 2 passam por  $\mu_L$ . Desta vez ambos os PQ's sofrem um ligeiro processo de carga. Entre -0.8 e -1.0, enquanto o PQ 1 mantém sua carga basicamente estável, temos um acentuado escoamento de carga no PQ 2 e a corrente no sistema, que vinha sofrendo sucessivos aumentos, tem uma considerável queda nesta faixa do potencial aplicado. Em  $V = -1.0$  o nível  $\epsilon_2$  passa pela base do reservatório da esquerda. Justamente neste valor do potencial aplicado o nível  $\epsilon_1 + U_1 + U_{12}$  passa por  $\mu_L$  e a carga no PQ 1 aumenta. A significativa quantidade de carga no PQ 1 fornece peso estatístico aos níveis ainda carregados do PQ 2 e contribui para a manutenção de carga neste PQ. Quando o potencial externo atinge -1.2 o nível  $\epsilon_1$  passa pela base do reservatório da esquerda e os dois PQ's são descarregados. Como consequência a corrente no sistema vai a zero.

#### 4.4 Carga eletrônica e corrente num sistema de dois PQ's fora do equilíbrio termodinâmico. Associação em série.

Nesta seção vamos considerar os PQ's associados em série (figura (2.2)) e submetidos a um potencial externo aplicado  $V$ . A exemplo do que fizemos na seção anterior começaremos por apresentar os resultados em que as interações  $U_1 = U_2 = \infty$ . Num primeiro caso (figura (4.16))  $U_{12} = 0$  e num segundo (figura (4.17))  $U_{12} = \infty$ . Após a descrição destes resultados, e a obtenção das primeiras informações sobre as características do transporte eletrônico, passaremos a abordar os resultados obtidos para valores finitos de  $U_1$  e  $U_2$  (menores que a profundidade da banda), onde outros níveis de energia, além de  $\epsilon_1$  e  $\epsilon_2$ , se tornam disponíveis para a ocupação eletrônica e o transporte se dá de forma mais complexa.

Como no caso da seção anterior, na obtenção dos resultados das figuras (4.16) e (4.17), o sistema é suposto com  $\mu_L$  e  $\mu_R$  inicialmente em -1.6. Mais uma vez, com  $\mu_L$  fixo neste valor, inicia-se um processo de descida de  $\mu_R$  e o sistema é retirado de sua condição inicial de equilíbrio. Em ambos os resultados os valores iniciais de  $\epsilon_1$  e  $\epsilon_2$  são -1.5 e -1.2, respectivamente. Acompanhando o processo de descida de  $\mu_R$ , e o conseqüente aumento de  $V$ ,

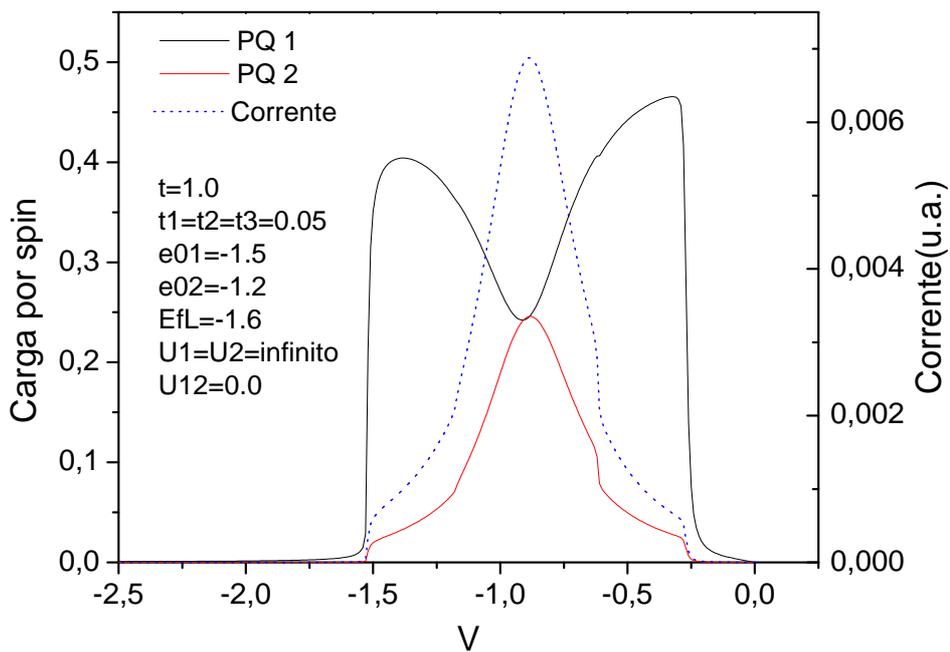


Figura 4.16: Carga e corrente em função de V num sistema de dois PQ's associados em série e fora do equilíbrio termodinâmico. Interação Coulombiana infinita no interior dos PQ's e zero entre estes.

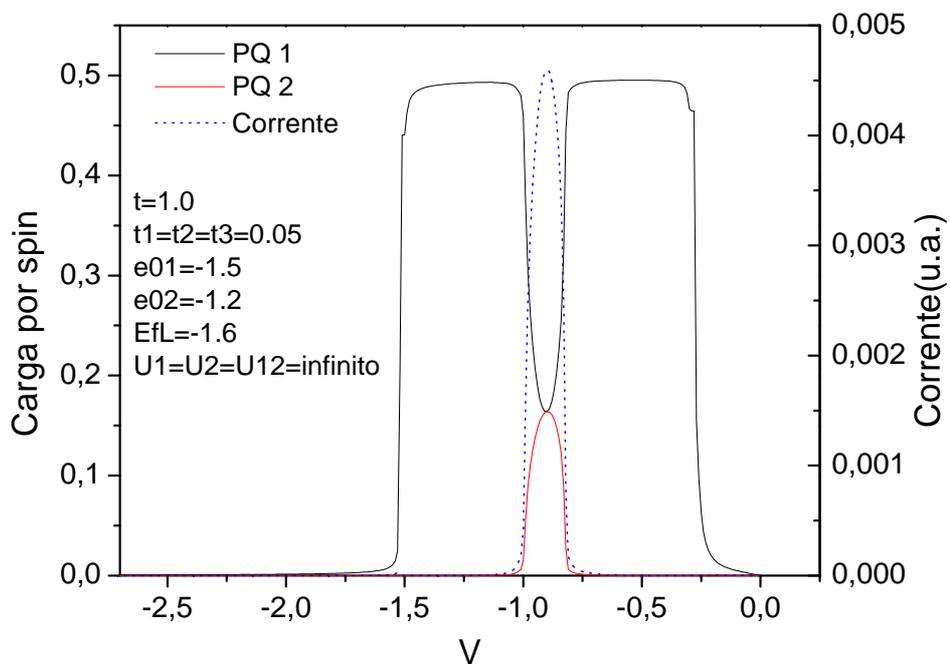


Figura 4.17: Carga e corrente em função de V num sistema de dois PQ's associados em série e fora do equilíbrio termodinâmico. Interação eletrônica infinita no interior e entre os PQ's.

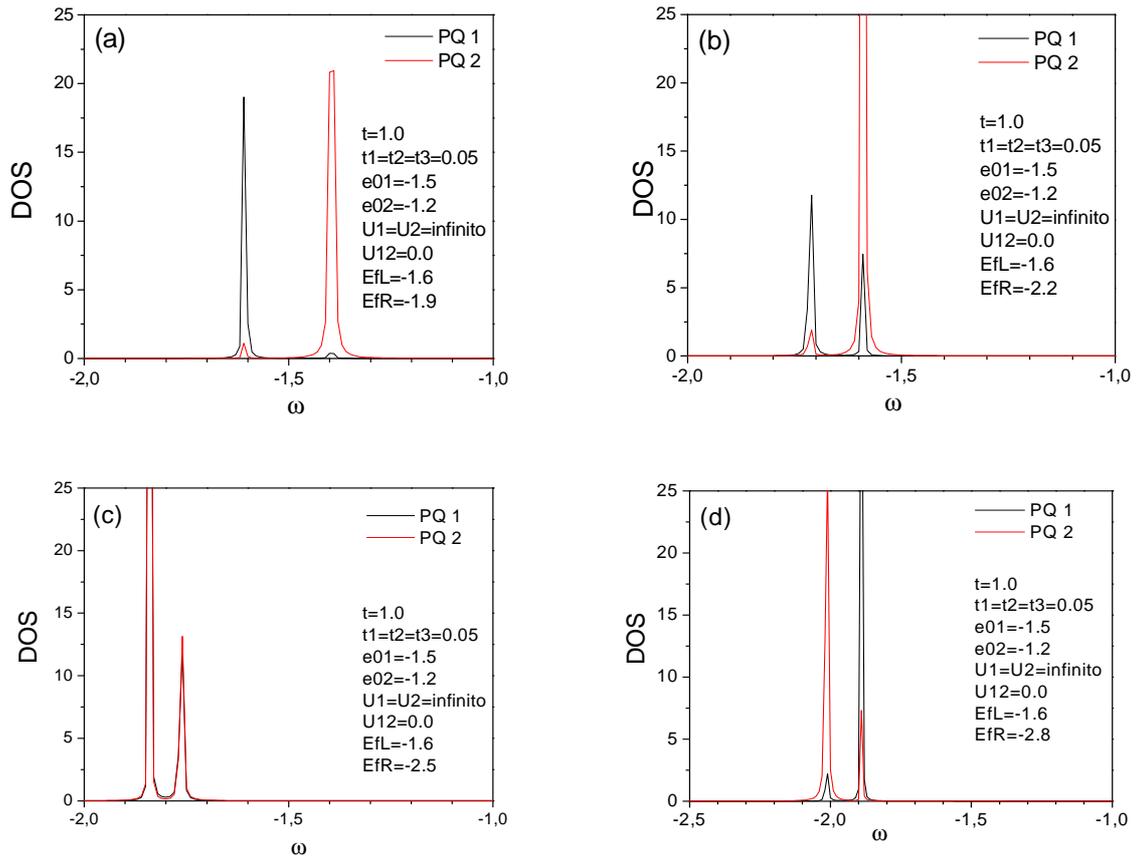


Figura 4.18: Densidade de estados calculada em quatro regiões diferentes do potencial externo.  $V = -0.3, V = -0.6, V = -0.9$  e  $V = -1.2$ .

estes níveis movimentam-se para baixo segundo as equações (1.6) e (1.7), com  $\alpha_1 = \frac{1}{3}$  e  $\alpha_2 = \frac{2}{3}$ . Analisando os resultados no que diz respeito aos processos de entrada e saída de carga nos PQ's podemos observar que, diferente do caso da topologia considerada na seção anterior, onde cada PQ oferece um canal independente para o fluxo de elétrons, e um aumento da corrente correspondia a um aumento da carga de algum dos PQ's, o transporte eletrônico pelos PQ's associados em série está relacionado basicamente com o escoamento de carga de um PQ à outro. Para entender esta característica do transporte nesta topologia começamos por descrever os resultados mostrados na figura (4.16) para as cargas e para a corrente em função de do potencial externo  $V$  aplicado ao sistema. Acompanhando o aumento deste potencial observamos que em  $V = -0.3$ , onde  $\epsilon_1$  atinge  $\mu_L$ , o PQ 1 é abruptamente carregado. Ao contrário do que ocorre para a associação em paralelo, este aumento de carga no PQ 1 não se reflete diretamente num aumento significativo da corrente. Logo em seguida, com  $\epsilon_2$  ainda por cima de  $\mu_L$ , inicia-se um processo pelo qual a carga no PQ 1 vai sendo transferida para o PQ 2 e a corrente no sistema vai aumentando, o que pode ser compreendido se entendermos a presença do PQ 2 como um canal pelo qual a carga do PQ 1 pode escoar. Outra forma de entender este processo é analisando as DOS

apresentadas na figura (4.18) para quatro diferentes regiões do potencial  $V$ . Notamos que com a aproximação gradativa entre os níveis  $\epsilon_1$  e  $\epsilon_2$ , à medida que o potencial externo vai aumentando, as curvas das DOS (que tem seu valor máximo nestes níveis e estendem-se pela região ao entorno dos mesmos) vão se sobrepondo uma na outra, de forma que o peso estatístico dos estados referentes a ocupação do PQ 1 vai se transferindo para o PQ 2. Voltando a analisar o comportamento da carga, bem como o da corrente, com o aumento do potencial externo temos que em  $V = -0.6$  o nível  $\epsilon_2$  atinge  $\mu_L$  e a carga no PQ 2, assim como a corrente, sofre um novo aumento. Em  $V = -0.9$  o nível  $\epsilon_2$  se alinha com  $\epsilon_1$  e os PQ's ficam igualmente carregados. Nesta região as DOS dos PQ's 1 e 2 estão completamente superpostas (veja a figura (4.18-c)) e o sistema se encontra em ressonância completa, com o PQ 2 possibilitando um escoamento perfeito para a carga que entra no PQ 1. Nesta região a corrente tem seu valor máximo. A partir deste ponto os níveis  $\epsilon_1$  e  $\epsilon_2$  começam a se afastar e o escoamento de cargas é invertido (figura 4.18-d), com o PQ 2 perdendo carga para o PQ 1 e a corrente sendo diminuída. Este processo se estende até  $V = -1.5$ , quando o sistema é descarregado com a passagem de  $\epsilon_1$  pela base do reservatório da esquerda.

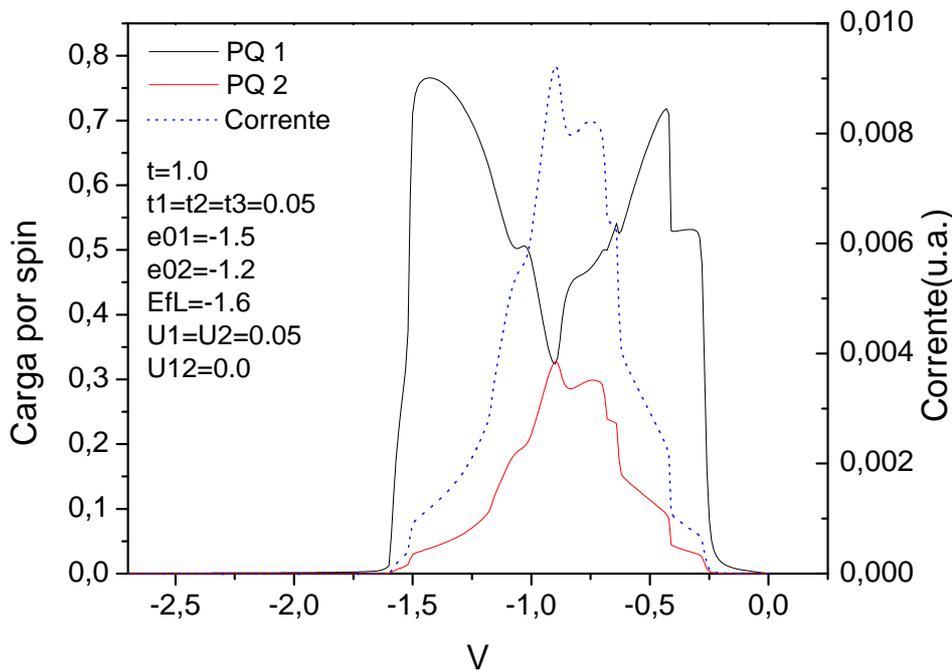


Figura 4.19: Carga e corrente em função de  $V$  num sistema de dois PQ's associados em série e fora do equilíbrio termodinâmico. Interação Coulombiana finita no interior dos PQ's e zero entre estes.

Considerando agora o resultado da figura (4.17), em que  $U_{12}$  também é infinito, observamos um comportamento similar à situação anterior, mas a ressonância correspondente à situação na qual  $\epsilon_1 = \epsilon_2$  se manifesta com um pico muito mais estreito em função do potencial aplicado. Este

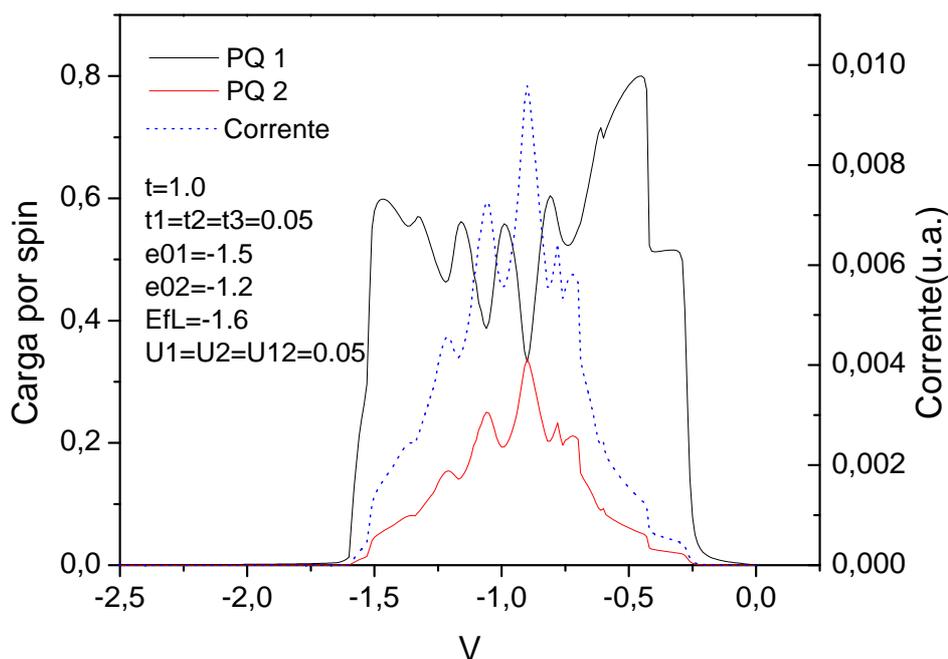


Figura 4.20: Carga e corrente em função de  $V$  num sistema de dois PQ's associados em série e fora do equilíbrio termodinâmico. Interação Coulombiana finita no interior em entre os PQ's.

comportamento é resultante da dificuldade do escoamento de carga produzido pela interação  $U_{12}$  entre os PQ's, já que esta puxa para cima o nível efetivo do PQ 2 quando o PQ 1 está carregado.

Para o caso em que as interações  $U_1$  e  $U_2$  são finitas apresentamos quatro resultados. Nos dois primeiros (figura (4.19) e (4.20)) estas interações são considerados iguais e nos dois últimos (figura (4.21) e (4.22)) diferentes. Como nos casos anteriores em equilíbrio o nível de Fermi está alinhado por baixo de  $\epsilon_1$  e  $\epsilon_2$ . Começaremos por analisar os resultados das figuras (4.19) e (4.20), o primeiro obtido para  $U_1 = U_2 = 0.05$  e  $U_{12} = 0.0$  e o segundo para  $U_1 = U_2 = U_{12} = 0.05$ . Acompanhando o comportamento da carga e da corrente durante o aumento do potencial temos que, no caso da figura (4.19), quando  $V < -0.3$ , o nível  $\epsilon_1$  penetra pela região abaixo de  $\mu_L$  e o PQ 1 é rapidamente carregado. A aproximação relativa entre os níveis  $\epsilon_1$  e  $\epsilon_2$  provoca um gradativo escoamento da carga do PQ 1 para o PQ 2 e a corrente vai sendo aumentada. Em  $V = -0.45$  o nível  $\epsilon_1 + U_1$  passa por  $\mu_L$  e a carga no PQ 1 sofre um novo aumento. Com uma maior quantidade de carga no PQ 1, e os níveis  $\epsilon_1$  e  $\epsilon_2$  relativamente perto um do outro, a transferência de cargas para o PQ 2 se torna mais acentuada e a corrente no sistema aumenta. Em  $V = -0.6$  o nível  $\epsilon_2$  começa a penetrar pela região por baixo de  $\mu_L$  e a carga no PQ tem um rápido aumento. Esta carga volta a aumentar em  $V = -0.75$ , onde  $\epsilon_2$  e  $\epsilon_1 + U_1$  ficam alinhados e atinge um valor máximo em  $V = -0.9$  onde são os níveis  $\epsilon_1$  e  $\epsilon_2$  que se encontram alinhados. Aumentando o potencial o escoamento de cargas é invertido e a

corrente diminui até que em  $V < -1.5$  a carga e a corrente são zero.

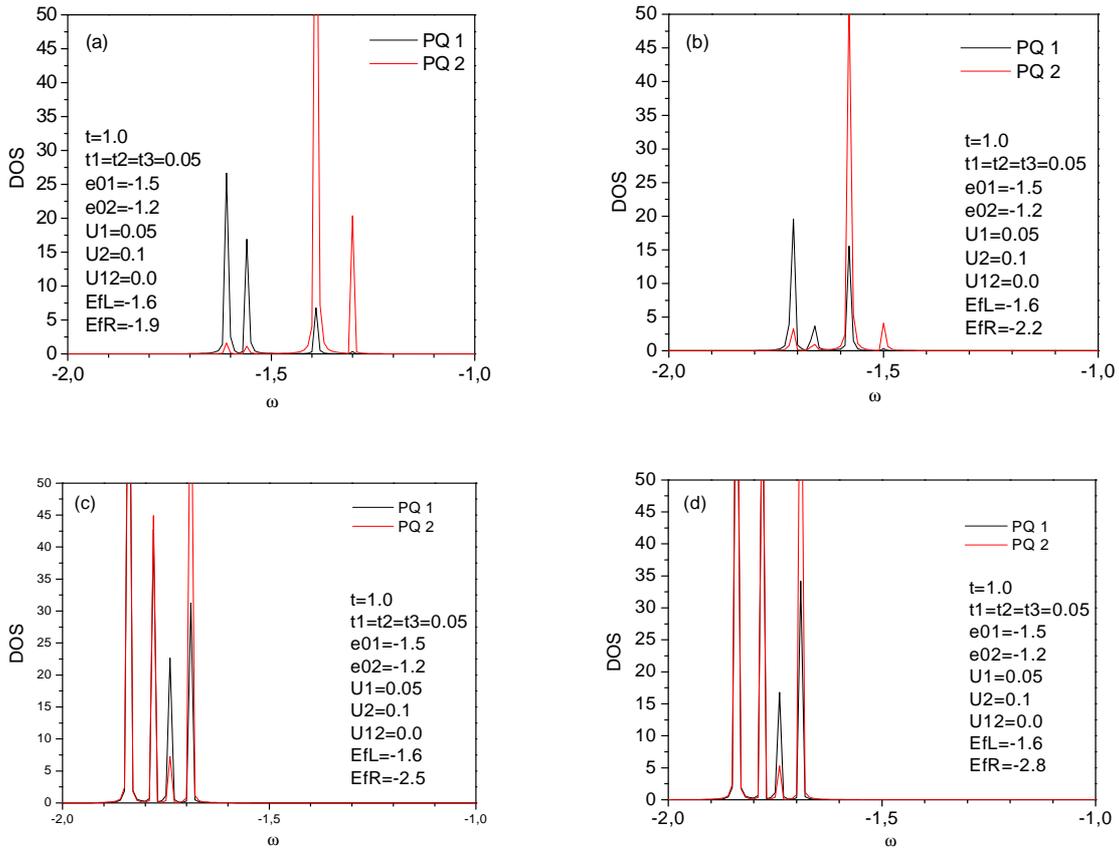


Figura 4.21: Densidade de estados calculada em quatro regiões diferentes do potencial externo.  $V = -0.3, V = -0.6, V = -0.9$  e  $V = -1.2$ .

Vamos considerar agora o resultado da figura (4.20) que corresponde a uma situação hipotética na qual a interação  $U_{12}$  entre os PQ's é igual às locais  $U_1$  e  $U_2$ . Analisando a ocupação eletrônica nos PQ's observamos que neste caso o escoamento de carga de um PQ a outro se torna mais acentuado em faixas específicas do potencial externo aplicado devido à presença de  $U_{12}$ . Se esta interação fosse nula, como no resultado anterior, dois seriam os níveis a serem ocupados nos PQ's, a saber,  $\epsilon_1$  e  $\epsilon_1 + U_1$  no PQ 1 e  $\epsilon_2$  e  $\epsilon_2 + U_2$  no PQ 2, com  $U_1 = U_2$ . Neste caso, considerando toda a faixa do potencial externo aplicado, ocorrem três situações especiais no que se refere à posição relativa destes níveis. Em uma delas ( $V=-0.9$ ) os dois níveis do PQ 1 se encontram emparelhados com os dois níveis do PQ 2 e nas outras duas situações temos o emparelhamento entre apenas um destes níveis ( $V=-0.75; V=-1.05$ ). Considerando agora que  $U_1 = U_2 = U_{12}$ , os PQ's podem ser ocupados cada qual em quatro diferentes níveis de energia. No caso,  $\epsilon_1$ ,  $\epsilon_1 + U_1 = \epsilon_1 + U_{12}$ ,  $\epsilon_1 + U_1 + U_{12} = \epsilon_1 + 2U_{12}$  e  $\epsilon_1 + U_1 + 2U_{12}$  no caso do PQ 1 e  $\epsilon_2$ ,  $\epsilon_2 + U_2 = \epsilon_2 + U_{12}$ ,  $\epsilon_2 + U_2 + U_{12} = \epsilon_2 + 2U_{12}$  e  $\epsilon_2 + U_2 + 2U_{12}$  no caso do PQ 2. Desta vez (considerando apenas níveis ocupados) ocorrem seis situações em que os níveis de energia dos PQ's estão alinhados o que se

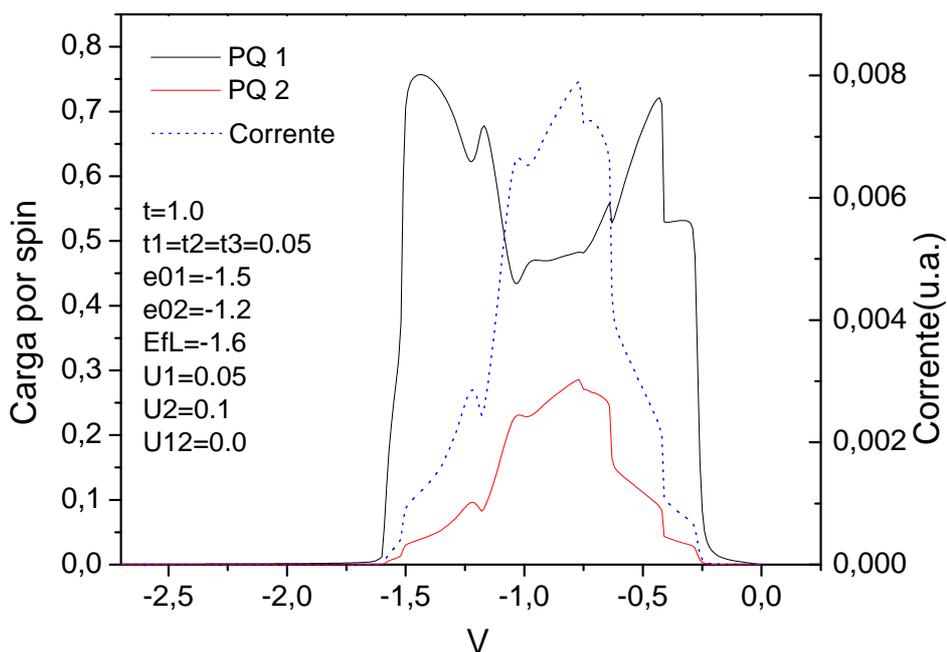


Figura 4.22: Carga e corrente em função de V num sistema de dois PQ's associados em série e fora do equilíbrio termodinâmico. Interação Coulombiana finita no interior dos PQ's e zero entre estes.

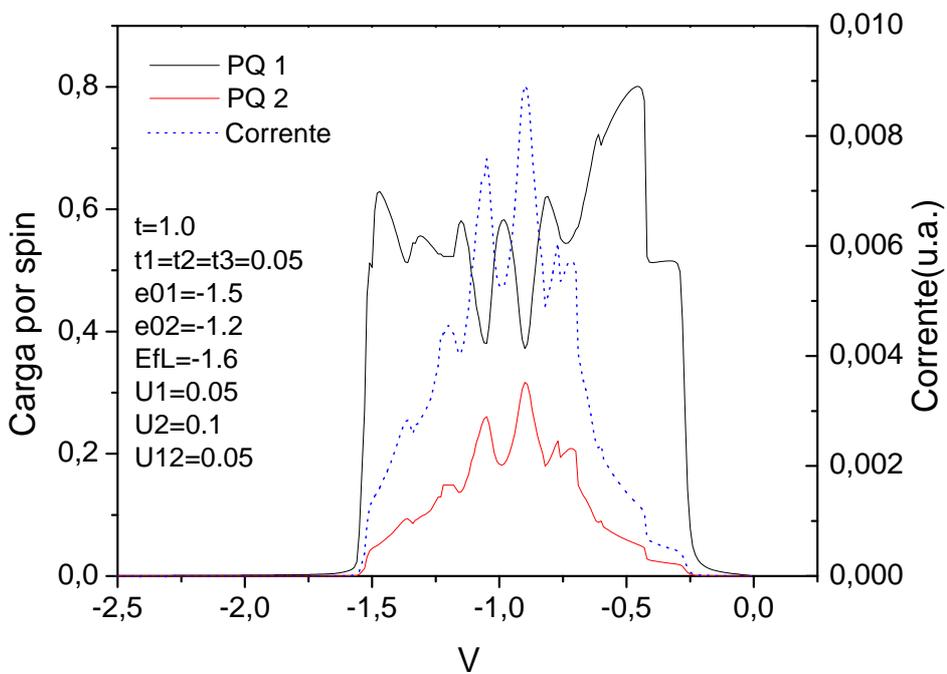


Figura 4.23: Carga e corrente em função de V num sistema de dois PQ's associados em série e fora do equilíbrio termodinâmico. Interação Coulombiana finita no interior e entre os PQ's.

manifesta na figura (4.20) por uma riqueza maior de picos.

Os resultados apresentados até agora mostraram em comum a presença de uma região de ressonância em  $V = -0.9$ , correspondente a passagem de  $\epsilon_1$  por  $\epsilon_2$ , onde o escoamento de cargas entre os PQ's 1 e 2 se dá de forma que a carga nestes dois PQ's permanecem iguais. Ocorre que, como para estes resultados consideramos  $U_1 = U_2$ , os dois PQ's emparelham todos os seus níveis ocupados e esta coincidência faz com que, nesta região, as curvas para as DOS nos PQ's se encontrem perfeitamente alinhadas (figura(4.18-c)). Isto resulta também numa carga idêntica, como mostra as figuras (4.19) e (4.20).

Antes de terminar o capítulo vamos apresentar mais dois resultados, desta vez correspondendo ao caso mais geral em que  $U_1$  e  $U_2$  são diferentes. Mais uma vez o sistema foi preparado com  $\mu_L$  fixo em -1.6,  $\mu_R$  variando de -1.6 até -4.6, e os níveis  $\epsilon_1$  e  $\epsilon_2$  considerados inicialmente em -1.5 e -1.2, respectivamente. Considerando primeiro o resultado da figura (4.22), obtido para  $U_1 = 0.05$ ,  $U_2 = 0.1$  e  $U_{12} = 0$ , observamos que, da mesma forma que nos outros resultados obtidos para a associação em série, a aproximação relativa entre  $\epsilon_1$  e  $\epsilon_2$  na faixa do potencial externo que vai até  $V = -0.9$  acarreta um gradativo escoamento de cargas do PQ 1 para o PQ 2, o que, como explicamos anteriormente, resulta da superposição das curvas das DOS nos PQ's (figura 4.21). Analisando as curvas obtidas para as cargas observamos que este processo se dá de forma mais acentuada em cinco regiões do potencial aplicado. As três primeiras regiões correspondem respectivamente à entrada dos níveis  $\epsilon_1$ ,  $\epsilon_1 + U_1$  e  $\epsilon_2$  na região por baixo de  $\mu_L$ . Na quarta região em  $V = -0.75$ , onde o escoamento se apresenta mais eficiente, temos que os níveis  $\epsilon_1 + U_1$  e  $\epsilon_2$  se encontram alinhados e na quinta, em  $V = -0.9$ , temos o emparelhamento dos níveis  $\epsilon_1$  e  $\epsilon_2$  e a conseqüente inversão no escoamento de cargas. Diferentemente do que vinha acontecendo até agora, observamos que nesta última região o escoamento não é suficiente para que as cargas fiquem igualmente distribuídas nos PQ's. Acontece que, como agora consideramos  $U_1 \neq U_2$ , este emparelhamento não coincide com alinhamento dos níveis  $\epsilon_1 + U_1$  e  $\epsilon_2 + U_2$  de forma que as curvas para as DOS não se encontram completamente superpostas nesta região do potencial aplicado (figura (421-c)). O resto do comportamento é similar aos anteriores.

Terminamos por apresentar o resultado da figura (4.23), que difere do resultado que acabamos de apresentar pela simples presença de uma repulsão  $U_{12} = 0.05$  entre os PQ's. A exemplo do que fizemos anteriormente, comprovamos que a interação coulombiana dá origem a uma riqueza maior na estrutura de picos da carga nos PQ's e da corrente.