



**Laercio Costa Ribeiro**

**Transporte fora do equilíbrio em estruturas de  
pontos quânticos**

**Dissertação de Mestrado**

Dissertação apresentada como requisito parcial para obtenção do grau de Mestre pelo programa de Pós Graduação em Física do Departamento de Física da PUC-Rio.

Orientador: Enrique Victoriano Anda

Rio de Janeiro  
Abril de 2005

**Laercio Costa Ribeiro**

## **Transporte fora do equilíbrio em estruturas de pontos quânticos**

Dissertação apresentada como requisito parcial para obtenção do grau de Mestre pelo programa de Pós Graduação em Física do Departamento de Física do Centro Técnico Científico da PUC-Rio. Aprovada pela Comissão Examinadora

**Prof. Enrique Victoriano Anda**

Orientador

Departamento de Física – PUC-Rio

**Profa. Maria Augusta Davidovich**

Departamento de Física - PUC-Rio

**Prof. Carlos Egues**

Instituto de Física – USP-São Carlos

**Prof. José Eugenio Leal**

Coordenador Setorial do Centro

Técnico Científico – PUC-Rio

Rio de Janeiro, 15 de abril de 2005

Todos os direitos reservados. É proibida a reprodução total ou parcial do trabalho sem autorização da universidade, do autor e do orientador.

## **Laercio Costa Ribeiro**

Graduou-se em licenciatura em física na UFRRJ (Universidade Federal Rural do Rio de Janeiro) em 2003.

### Ficha Catalográfica

Costa Ribeiro, Laercio

Trasporte fora do equilíbrio em estruturas de pontos quânticos / Laercio Costa Ribeiro; orientador: Enrique Victoriano Anda. – Rio de Janeiro: PUC, Departamento de Física, 2005.

71 f.:il. ; 30 cm

Dissertação (Mestrado) – Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro, Departamento de Física.

Inclui referências bibliográficas.

1. Física - Teses. 2. Sistemas fortemente correlacionados. 3. Pontos quânticos. 4. Funções de Green. Anda, Enrique Victoriano. II. Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro, Departamento de Física. III. Título.

CDD: 530

Para meus pais, Laercio de Almeida Ribeiro e  
Jussara Fraga Costa Ribeiro.

## Agradecimentos

À Deus, pela possibilidade de escrever este trabalho.

Ao meu orientador, prof. Enrique, pela paciência e pela amizade.

Aos professores Montenegro, Sigaud, Carlos Maurício, Vera e Rosane, que em muito contribuíram para a minha formação através das disciplinas ministradas.

À professora Maria Augusta pelas correções.

Ao amigo Edson pelas conversas a respeito do tema.

Aos colegas de sala, Marcelo, Luís, André, Ney, Anderson, Adriano, Felipo, e a todos os demais que de forma direta ou indireta contribuíram para o desenvolvimento deste trabalho.

À PUC-Rio pela infra estrutura deixada à disposição.

Ao CNPq pelo suporte financeiro dispensado.

## Resumo

Costa Ribeiro, Laercio; Anda, Enrique Victoriano. Rio de Janeiro, 2005. 71p. Transporte Fora do equilíbrio em estruturas de pontos quânticos. Dissertação de Mestrado - Departamento de Física, Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro.

Neste trabalho estudamos as propriedades eletrônicas e de transporte de uma molécula artificial diatômica que consiste de dois pontos quânticos conectados a dois contatos submetidos a um potencial externo. Cada ponto quântico é descrito por um nível de energia no qual os elétrons estão fortemente correlacionados pela interação Coulombiana no interior e entre os pontos quânticos. Duas topologias são consideradas para o sistema: uma corresponde aos dois pontos dispostos numa linha de condução e o outro a uma configuração em paralelo. O problema é tratado com as funções de Green obtidas a partir do formalismo de Keldysh para o sistema fora do equilíbrio. Estas funções permitem o cálculo da carga nos pontos quânticos e da corrente elétrica no sistema. A física do sistema é controlada principalmente pelas várias interações Coulombianas. Para a configuração em paralelo existem dois canais interferindo para a propagação do elétron pelo sistema, cujas propriedades dependem do estado de carga de cada ponto quântico. Para a configuração em série a corrente é controlada pela possibilidade da carga ser drenada de um ponto quântico ao outro. O estado de carga em cada ponto quântico e a corrente elétrica são discutidos em detalhe para as duas configurações e para diferentes valores dos parâmetros que definem o sistema.

## Palavras-chave

Sistemas fortemente correlacionados, Pontos quânticos, Funções de Green, Bloqueamento de Coulomb, Formalismo de Keldysh.

## Abstract

Costa Ribeiro, Laercio.; Anda, Enrique Victoriano. Rio de Janeiro, 2005. 71p. Out of equilibrium transport in quantum dots structures. Dissertação de Mestrado - Departamento de Física, Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro.

In this work we study the electronic and transport properties of an artificial diatomic molecule consisting of two quantum dots connected to two leads under the effect of an applied potential. Each dot is described by one energy level in which the electrons are supposed to be strongly correlated due to intra-dot and inter-dot Coulomb interaction. Two topologies are considered for the system: one corresponds to two dots along a conducting line and the other in a parallel configuration. The problem is treated using the out-of-equilibrium Green function Keldysh formalism. The Green functions permit the calculation of the charge in the dots and the electronic current of the system. The physics is controlled mainly by the various Coulomb interactions. For the parallel configuration there are two interfering channels for the electron to go along the system, which properties depend upon the state of charge of each dot. For the serial configuration the current is controlled by the possibility of the charge to be drained from one dot to the other. The state of charge at each dot and the electronic current are discussed in detail for the two configurations and for different values of the parameters that define the system.

## Keywords

Strongly correlated systems, Quantum dots, Green functions, Coulomb blockade, Keldysh formalism.

# Sumário

1	Introdução	13
1.1	Nanociência e nanotecnologia	13
1.2	Análise e manipulação da matéria em escala nanoscópica. Microscópio de tunelamento e de força atômica	13
1.3	Mecanismo de transporte em átomos artificiais. Bloqueamento de Coulomb	15
1.4	Transporte fora de equilíbrio. Os efeitos de um potencial externo	21
2	Transporte Nanoscópico em sistemas fortemente correlacionados. Pontos Quânticos	25
2.1	Descrição física do sistema	25
2.2	Funções de Green Retardadas e Avançadas	27
2.3	Funções de Green para os reservatórios de elétrons	27
2.4	Determinação das funções de Green: Método de equação de movimento	28
2.4.1	Funções de Green para os PQ's associados em paralelo	30
2.4.2	Funções de Green para os PQ's associados em série	34
2.5	Determinação autoconsistente da carga eletrônica e densidade de estados em equilíbrio termodinâmico.	36
3	Funções de Green para o sistema fora do equilíbrio termodinâmico. Formalismo de Keldysh	38
3.1	Formalismo de Keldysh	38
3.1.1	Pontos quânticos associados em série	39
3.1.2	Pontos quânticos associados em paralelo	42
3.2	Cálculo da corrente elétrica que atravessa o sistema	43
4	Resultados numéricos. Análise e discussões	46
4.1	Densidade de estados e carga eletrônica para o sistema de PQ's em equilíbrio termodinâmico. Associações em série e em paralelo	46
4.2	Carga eletrônica e corrente num PQ na presença de um potencial externo.	51
4.3	Carga eletrônica e corrente num sistema de dois PQ's fora do equilíbrio termodinâmico. Associação em paralelo.	54
4.4	Carga eletrônica e corrente num sistema de dois PQ's fora do equilíbrio termodinâmico. Associação em série.	59

5	Conclusões	67
	Referências	70

## Lista de Figuras

1.1	Átomos de Ferro sobre Cobre. (Fonte: IBM website)	14
1.2	Átomo artificial metálico conectado a um circuito eletrônico por dois fios também metálicos(emissor e receptor). Funciona como um transistor de um elétron <sup>4</sup> .	16
1.3	Barreiras de potencial produzidas pelos eletrodos na parte superior do átomo artificial de barreira variável.	17
1.4	Átomo artificial de barreira variável conectado a um circuito eletrônico por dois fios metálicos(emissor e receptor). Também funciona como um transistor de um elétron.	18
1.5	Condutância num átomo artificial(transistor de um elétron) em função do potencial de porta aplicado <sup>3,4</sup> .	18
1.6	Esta figura mostra os níveis de energia ocupados pelas cargas que minimizam a energia na região de confinamento. O terceiro diagrama(da esquerda para a direita) mostra a degenerescência entre os estados correspondentes às cargas $Q = -Ne$ e $Q = -(N + 1)e$ nesta região.	19
1.7	Representação esquemática do perfil de energia de um sistema constituído de um PQ conectado a dois reservatórios de elétrons.	21
1.8	Representação esquemática do perfil de energia de um sistema de dois PQs conectados a dois reservatórios de elétrons.	23
2.1	Pontos quânticos conectados em paralelo com dois reservatórios de elétrons.	26
2.2	Pontos quânticos conectados em série com dois reservatórios de elétrons.	26
2.3	Ponto quântico conectado ao reservatório da esquerda. Simetria de translação.	28
2.4	Pontos quânticos em paralelo e desconectados dos reservatórios.	30
2.5	Pontos quânticos em série conectados cada qual a um reservatório e desconectados entre si.	34
3.1	Ramos do tempo para as funções de Green fora de equilíbrio no formalismo de Keldysh.	39
3.2	Pontos quânticos associados em série.	40
3.3	Pontos quânticos associados em paralelo.	42

- 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. 46
- 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. 47
- 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. 48
- 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. 48
- 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. 49
- 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. 49
- 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. 50
- 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. 51
- 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. 52
- 4.10 Carga eletrônica no interior de um PQ em função do potencial externo aplicado. 52
- 4.11 Corrente elétrica no sistema de um PQ em função do potencial externo aplicado. 53
- 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. 55

- 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. 56
- 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. 56
- 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). 57
- 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. 60
- 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. 60
- 4.18 Densidade de estados calculada em quatro regiões diferentes do potencial externo.  $V = -0.3, V = -0.6, V = -0.9$  e  $V = -1.2$ . 61
- 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. 62
- 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. 63
- 4.21 Densidade de estados calculada em quatro regiões diferentes do potencial externo.  $V = -0.3, V = -0.6, V = -0.9$  e  $V = -1.2$ . 64
- 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. 65
- 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 em entre os PQ's. 65