

5 Conclusões

Neste trabalho apresentamos um estudo teórico do transporte eletrônico através de uma estrutura de dois PQ's conectados a dois reservatórios de elétrons e com correlação eletrônica forte. Estudamos este sistema em duas configurações; uma na qual os PQ's são conectados em paralelo com os reservatórios e outra na qual são conectados em série. A importância em estudar este tipo de sistema está na possibilidade de sua utilização como modelos para se simular o comportamento de átomos e moléculas reais. Vários aspectos deste estudo são de grande interesse. Estes sistemas podem corresponder a configurações topológicas de uma molécula diatômica real entre dois condutores, como tem sido estudado extensamente nos últimos anos no âmbito da eletrônica molecular ou de nanocontatos metálicos na presença de uma atmosfera de Hidrogênio, por exemplo. Por outro lado a física do transporte através de estruturas de PQ's, que permitem manipular os níveis de energia variando o potencial de porta ou, numa situação fora de equilíbrio, controlando o potencial externo aplicado é de grande interesse na perspectiva de desenho de dispositivos com uma variedade de aplicações possíveis.

No início do trabalho estudamos um sistema de dois PQ's em equilíbrio e num regime em que as interações Coulombianas nos são infinitas, e zero ou infinita entre eles. Os resultados mostraram que as diferenças topológicas não interferem na carga final dos PQ's, que estão mais relacionadas com suas DOS. No caso em que a interação entre os PQ's é zero obtivemos que o processo de carga é mais simples, com os PQ's se carregando de forma independente. Já no caso em que a interação é infinita a presença de carga num dado PQ passa a dificultar a entrada de carga no outro, fazendo com que os processos de carga dos PQ's sejam fortemente dependentes.

Numa espécie de aproximação preliminar ao estudo da situação mais geral, correspondente ao sistema de dois PQ's fora do equilíbrio, analisamos um sistema mais simples de um único PQ conectado a dois reservatórios e sob a ação de um potencial externo aplicado. As curvas que obtivemos reproduzem os resultados já conhecidos da teoria de um PQ, e comprovamos a consistência da teoria de dois PQ's no que se refere à sua redução a este limite.

Como tema central de nosso trabalho estudamos o sistema de dois PQ's

conectados a dois contatos e na presença de um potencial externo aplicado. Ao contrário do que ocorre com o sistema em equilíbrio os resultados mostraram que neste caso a topologia do sistema é determinante no que se refere aos processos de carga nos PQ's e às propriedades de transporte do sistema. Acontece que com o sistema fora de equilíbrio a variação dos níveis de energia nos PQ's, como resposta ao aumento do potencial externo, se dá de forma diferente para as duas topologias.

Na configuração em paralelo estes níveis se deslocam com a mesma rapidez, ambos caindo da ordem da metade do potencial externo. Os resultados mostraram que neste caso, por estarem relacionadas à abertura de um canal direto entre os reservatórios, a ocupação de um dado PQ tem reflexo direto na corrente que atravessa o dispositivo. Os resultados mostraram também que a presença de carga nos dois PQ's resulta numa interferência construtiva entre as correntes que fluem nos dois braços do sistema, considerados iguais. Se estes fossem diferentes a interferência entre as correntes poderia ser destrutiva.

Na configuração em série o efeito provocado pelo aumento do potencial externo não é o mesmo nos dois PQ's, o que resulta numa resposta diferente no que se refere ao deslocamento de seus níveis de energia. Vimos em nosso trabalho que o movimento relativo entre estes níveis está associado ao escoamento de carga de um PQ a outro e que este comportamento está associado à superposição gradativa das DOS à medida que os níveis vão se aproximando.

Os detalhes da ocupação em cada configuração foram estudados em termos da magnitude das interações Coulombianas no interior e entre os PQ's. Os resultados mostraram que nas duas configurações a ocupação eletrônica é mais complexa quando estas interações são finitas, o que se deve à presença de mais níveis de muitos corpos para serem ocupados nos PQ's. Neste caso destacamos o papel de uma interação Coulombiana finita entre os PQ's. Os resultados mostraram que na configuração em paralelo esta interação está relacionada com a manutenção de carga num dado PQ em função da presença de carga no outro PQ, facilitando a circulação da carga ao longo do sistema. Já no caso da configuração em série a interação entre os PQ's resulta no aparecimento de algumas regiões nas quais o escoamento de cargas se dá de forma ainda mais acentuada, estreitando a região de ressonância do sistema.

Este trabalho tem desdobramentos em várias direções. A respeito da configuração em paralelo o trabalho não explorou a física derivada da possibilidade de interferências na corrente devidas a diferenças de fase entre os dois braços do circuito. A incorporação na teoria de um campo magnético que introduz um fluxo através do circuito, criando um interferômetro de

Aharanov-Bohm, seria uma forma simples de incorporar a defasagem entre os braços como uma variável essencial para o estudo da corrente deste sistema.

Outro aspecto de grande interesse a ser estudado é o comportamento desses sistemas quando se injeta uma corrente polarizada de spin ou quando a polarização é produzida ou pela atuação de um campo magnético nos PQ's ou pela sua constituição a partir de semicondutores magnéticos.

Da perspectiva da computação quântica, um sistema de dois PQ's interagentes pode constituir um dispositivo para criar estados emaranhados. Neste caso a interação de troca entre os pontos quânticos deveria ser incluída, o que complicaria um pouco o formalismo proposto sem, no entanto, criar dificuldades essenciais no estudo desta problemática.

Estes são alguns dos desdobramentos possíveis do estudo realizado na tese que iremos desenvolver no futuro.