

3

Transporte perto do equilíbrio e longe do equilíbrio

3.1 Cálculo da carga e condutância sob campo elétrico infinitesimal

Nesta primeira parte estudamos um sistema perto do equilíbrio, ou seja, o gradiente de potencial a que está submetido o PQ é infinitesimal, $\Delta V \approx 0$. Em consequência, $\varepsilon_{fe} \approx \varepsilon_{fd}$. Nesse momento o único potencial a ser variado é o potencial de porta (V_g), que altera o nível do estado localizado no PQ, ou seja, ε_0 e $\varepsilon_0 + U$, conforme fig. (3.1). Nos nossos cálculos, parametrizamos a interação coulombiana (U) e o campo magnético (B). Nosso objetivo é criar um filtro de spin com o uso de um PQ ligado a dois terminais. Este tipo de estudo tem sido de grande interesse em spintrônica^{35,36}.

3.1.1 Ausência de campo magnético e correlação.

Inicialmente consideraremos $B = 0$ e $U = 0$. Desta maneira os elétrons com spin para cima e spin para baixo ocupam o mesmo nível de energia localizado no PQ. Na fig. (3.2), apresentamos o gráfico da carga no PQ, calculado de maneira autoconsistente, em função do potencial de porta (V_g). Quando a energia do estado localizado for menor que a energia de Fermi, o PQ está carregado. É bom lembrar que o campo elétrico aplicado é infinitesimal, ou seja, estamos considerando que a diferença da energia de Fermi entre ambos os contatos é infinitesimal. À medida que aumentamos o potencial de porta, chegamos a uma situação em que a energia do estado localizado se torna maior que a energia de Fermi, e o PQ fica descarregado.

Analisamos para a mesma situação a condutância em função do potencial de porta fig. (3.3). Quando o estado localizado do PQ coincide com o nível de Fermi dos reservatórios de ambos os lados, temos uma situação de ressonância que é caracterizada por um pico no gráfico de condutância.

Como ambos os elétrons, spin para cima e para baixo, estão ocupando exatamente o mesmo estado localizado, as linhas mostrados para cada spin nas figs. (3.2 e 3.3) são sobrepostas. Para que isso não ocorra e torne possível uma seleção de spin na carga e na condutância, devemos de alguma maneira separar o estado localizado do elétron com

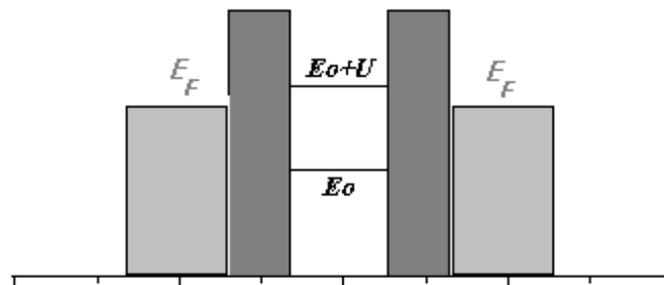


Figura 3.1: Diagrama de níveis na ausência de campo elétrico.

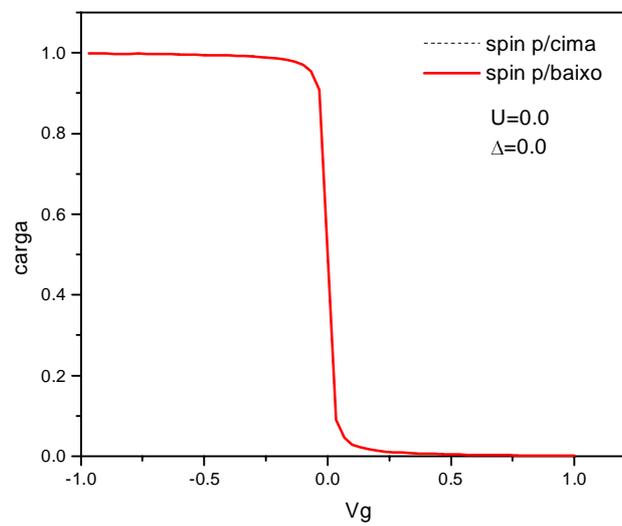


Figura 3.2: Carga no PQ versus potencial de porta para $U = 0eV$, $\Delta = 0eV$.

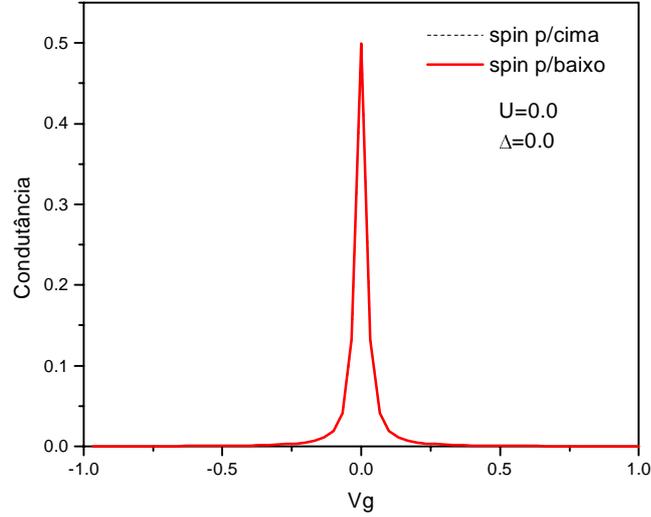


Figura 3.3: Condutância versus potencial de porta para $U = 0eV$, $\Delta = 0eV$.

spin para cima do com spin para baixo no PQ. Isto pode ser feito através da variação de alguns parâmetros. A seguir faremos um estudo apresentando diferentes maneiras que tornam possível tal separação.

3.1.2 Campo magnético na ausência de correlação.

A primeira alternativa por nós adotada para desdobrar o estado localizado no PQ, será a aplicação de um campo magnético externo (B), este desdobramento (efeito Zeeman) é de 2Δ , onde:

$$\Delta = \mu g_L B, \quad (3.1)$$

sendo g_L o fator de Landé e B o campo magnético externo aplicado. Considerando g_L positivo, elétrons com spin para baixo que sem a presença do campo magnético ocupavam um determinado nível de energia ε , após a aplicação de B , terão energia $\varepsilon + \Delta$ e da mesma maneira elétrons com spin para cima terão energia $\varepsilon - \Delta$.

Assim, resolveremos o problema de um PQ submetido a um campo magnético externo ($B \neq 0$), negligenciando os efeitos de interação coulombiana ($U = 0$). O efeito

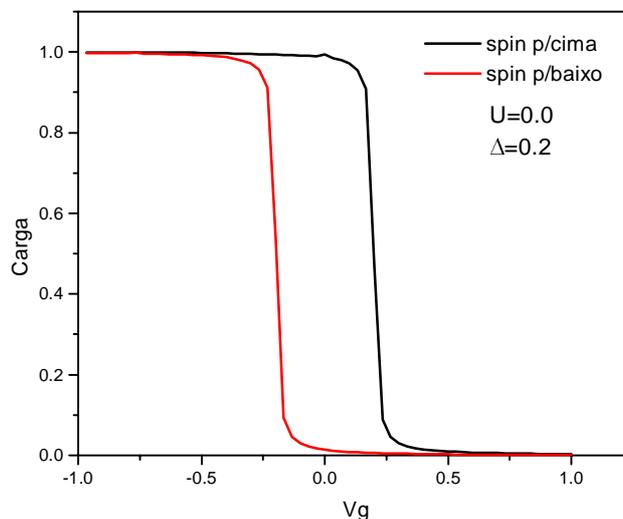


Figura 3.4: Carga no PQ versus potencial de porta para $U = 0eV$, $\Delta = 0.2eV$.

Zeeman também modifica os estados no contato, mas sua manifestação mais importante ocorre no próprio PQ, pois ao separar a energia dos estados localizados spin para cima e spin para baixo, introduz mudanças drásticas na condutância dependendo da direção do spin. Se o PQ for pequeno o suficiente para que seja possível considerar os níveis de ressonância bem localizados, com largura menores que as separações causadas pelo efeito Zeeman, então será possível manipular o potencial de porta V_g de maneira a ter apenas um dos spins em ressonância, enquanto o outro estará fora de ressonância. Neste caso, nossa amostra funcionará como um perfeito filtro de spin, com uma corrente completamente polarizada circulando no sistema. Isso é mostrado na fig. (3.4), onde é apresentada a carga do PQ em função do potencial aplicado.

Para potenciais de porta pequenos, ambos os estados localizados estão abaixo do nível de Fermi e ambas as cargas ocupam o PQ. À medida que aumentamos V_g , a primeira carga a sair do PQ é a carga com spin para baixo, visto que no desdobramento causado pelo efeito Zeeman esta ocupa um maior nível de energia, supondo o fator de Landé positivo. Portanto quando $V_g > 0$, temos apenas carga com spin para cima no interior do PQ. Se continuarmos aumentando V_g , em um determinado momento nem a carga com spin para cima permanece no PQ.

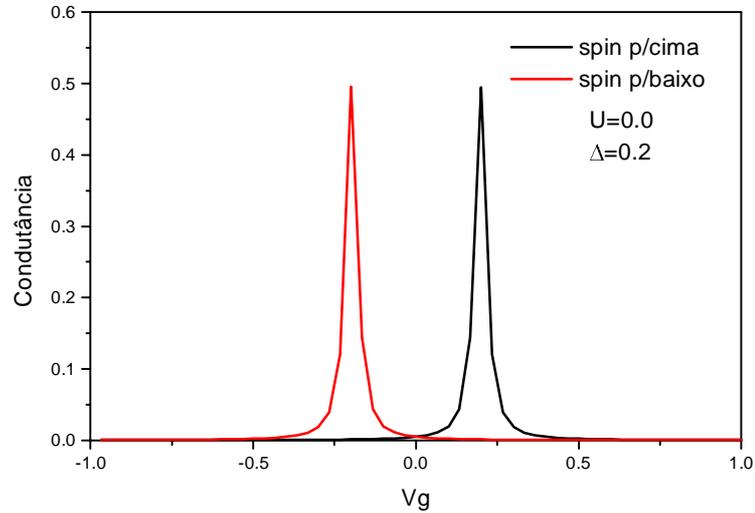


Figura 3.5: Condutância versus potencial de porta para $U = 0eV$, $\Delta = 0.2eV$.

Na fig. (3.5), mostramos a condutância em função do V_g . Mais uma vez é possível notar a separação dos níveis de diferentes spins causada pelo efeito Zeeman, visto que existem dois picos distintos de condutância dependendo do spin eletrônico, picos estes que ocorrem quando o sistema atinge seus respectivos estados de ressonância. Deste ponto de vista, um PQ com uma ressonância bem definida atua como um filtro de spin perfeito.

3.1.3 Campo magnético e correlação

É interessante mostrar nesse momento como ficam a carga e a condutância ao adotarmos uma descrição mais realista para o PQ, incorporando a repulsão coulombiana, U , e o campo magnético.

A condutância em função do potencial de porta é apresentado na fig. (3.6). Notamos a presença de quatro picos de condutância, dois para cada tipo de spin. O cálculo da carga com a presença do campo magnético e considerando a interação coulombiana será apresentado posteriormente na fig. (3.7).

Na fig. (3.7), mostramos a carga dentro do PQ para diferentes spins, como função

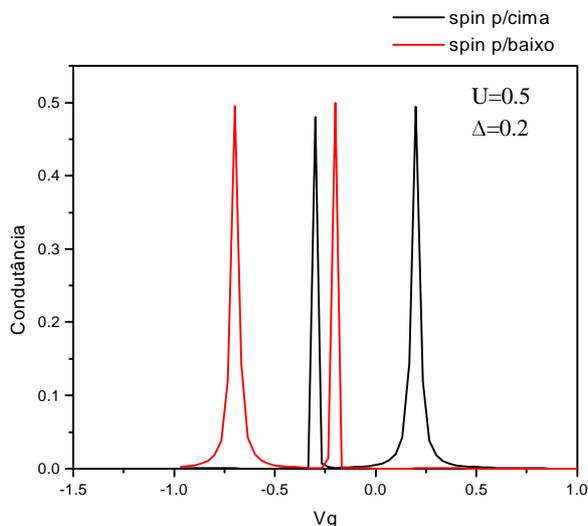


Figura 3.6: Condutância versus potencial de porta para $U = 0.5eV$, $\Delta = 0.2eV$.

do potencial de porta. É possível notar que quando o estado com spin para cima entra em ressonância, a carga com este spin cresce abruptamente. Aumentando o potencial de porta, o elétron com spin para baixo entra no PQ. No entanto, devido ao bloqueamento coulombiano que impede a entrada de um elétron extra quando já existe um dentro do PQ, a carga com spin para baixo aumenta, reduzindo a carga com spin para cima, conservando a carga total existente do PQ. Nesse processo a condutância reflete uma situação completamente polarizada quando existe apenas um tipo de elétron no PQ, mas perde sua polarização quando o segundo elétron entra no mesmo.

3.2 Longe do equilíbrio (campo elétrico finito)

3.2.1 Introdução

Nesta seção, discutiremos o sistema longe do equilíbrio com a aplicação de um campo elétrico finito. A diferença de potencial (ΔV) é igual a diferença entre os níveis de Fermi dos dois reservatórios de partícula aos quais o PQ está conectado, conforme mostrado na fig. (3.8).

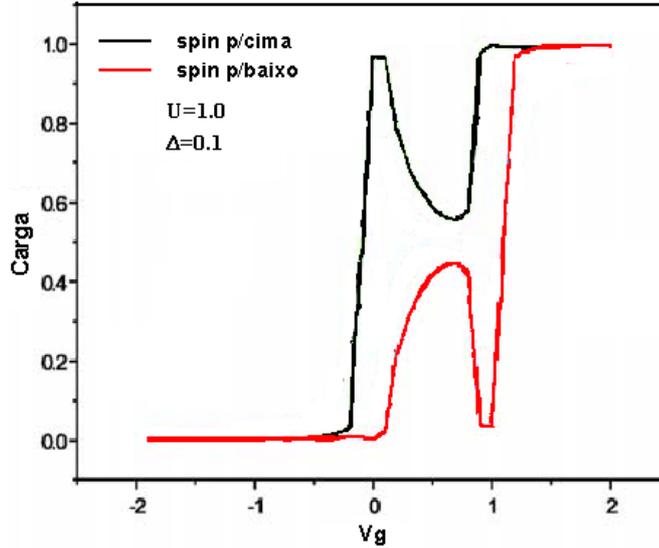


Figura 3.7: Carga versus potencial de porta com correlação e campo magnético.

$$\Delta V = \varepsilon_{fd} - \varepsilon_{fe} \quad (3.2)$$

3.2.2 Efeito na ausência do campo magnético e de correlação

Como foi comentado na seção 1.2 (Tunelamento ressonante) da introdução desta tese, ao submetemos o PQ a um campo elétrico finito (ver fig.(1.2)), podemos dividir este processo de transporte em três situações distintas.

A primeira é quando a energia do estado localizado é maior que a energia de Fermi do lado esquerdo e direito ($\varepsilon_{PQ} > \varepsilon_{fe} > \varepsilon_{fd}$). Neste caso, não ocorre tunelamento e conseqüentemente não existe carga entrando no PQ nem carga sendo transmitida de um lado para o outro.

A segunda é quando o estado localizado do PQ está entre a energia de Fermi do lado esquerdo e direito ($\varepsilon_{fe} > \varepsilon_{PQ} > \varepsilon_{fd}$). Neste caso, a carga entra no PQ e é transmitida do lado esquerdo para o direito, visto que o campo elétrico é aplicado de forma que o transporte seja nesta direção.

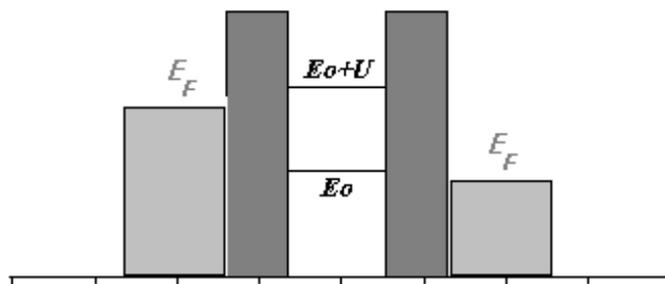


Figura 3.8: Diagrama de níveis na presença de campo elétrico.

A terceira é quando o estado localizado do PQ fica tão baixo que entra em uma região onde o lado esquerdo não possui cargas para serem transmitidas ($\varepsilon_{PQ} < -2.0$).

Para nossos cálculos numéricos, adotamos $\varepsilon_{fe} = -1.8$ e $\varepsilon_{fd} = -1.8 - \Delta V$ conforme pode ser visto na fig.(3.9), e consideramos as energias em unidades de t . Além disso, supomos o nível ressonante ($\varepsilon_0 = -1.7$). Maiores detalhes a respeito das densidades de estados usadas podem ser vistos no Apêndice A. Analisando a fig.(3.10) podemos constatar as três situações citadas acima. Quando a diferença de potencial (ΔV) é nula, não existe carga no PQ. À medida que aumentamos ΔV , a carga começa a penetrar no PQ até que o estado localizado fique abaixo da energia de Fermi do contato do lado esquerdo, fazendo com que não entre mais carga no PQ, e a que já estava dentro escorra para o contato do lado direito. Como os valores desses parâmetros que causam o desdobramento do estado localizado no PQ são nulos, ou seja, $U = 0$ e $\Delta = 0$, nenhuma diferença de carga é notada entre spin para cima e para baixo.

Adotando o mesmo procedimento para a corrente fig.(3.11), constatamos exatamente as mesmas três situações citadas distintas, inclusive com o corte da corrente.

3.2.3 Efeito da correlação na ausência do campo magnético

Ao considerarmos apenas a interação coulombiana, notamos que esta interação, quando considerada individualmente, não pode ser um parâmetro usado para filtros de spin. Esta afirmação pode ser feita através da análise da fig.(3.12). Note que tanto

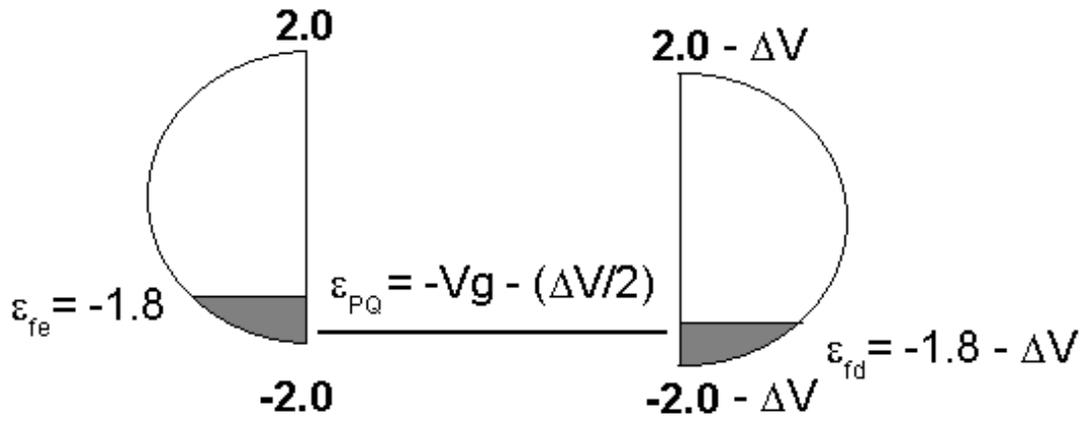


Figura 3.9: Representação simplificada da densidade de estados das semicadeias e do estado localizado do PQ.

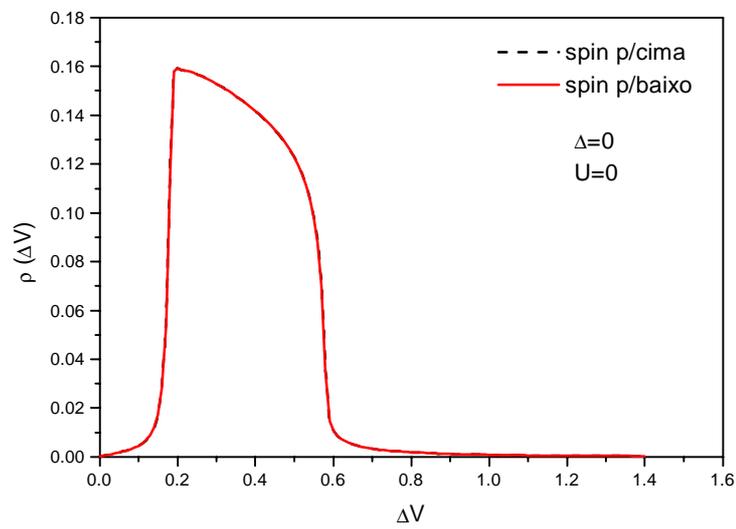


Figura 3.10: Carga versus diferença de potencial para o caso $U = 0$, $\Delta = 0$.

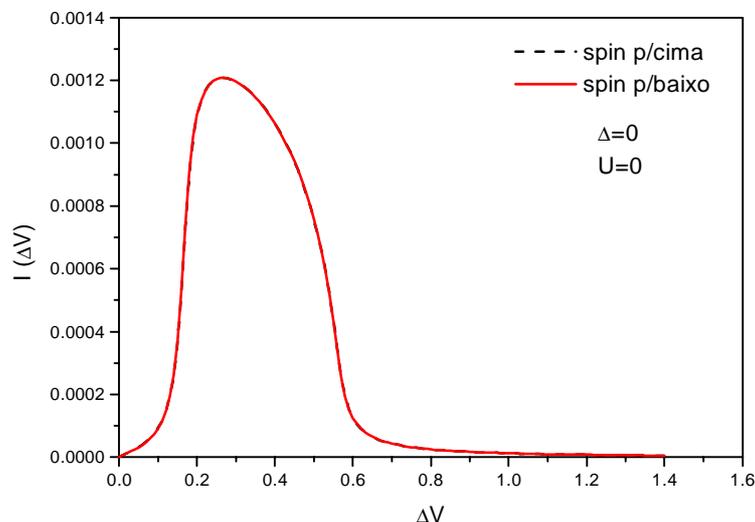


Figura 3.11: Corrente versus diferença de potencial para o caso $U = 0$, $\Delta = 0$.

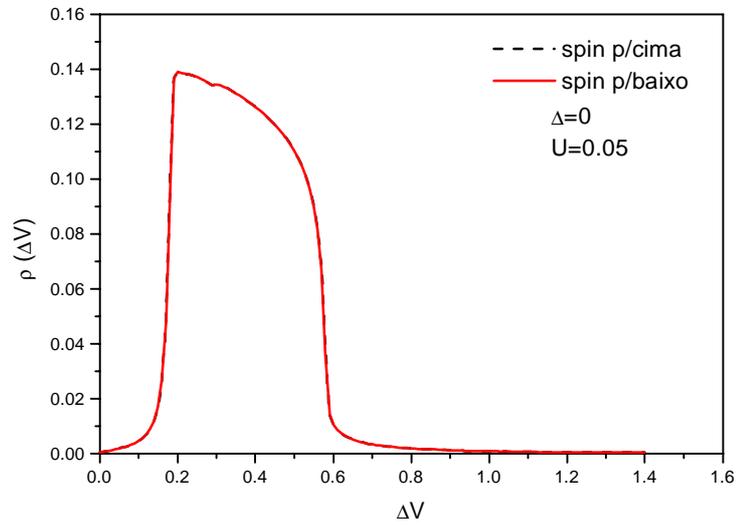
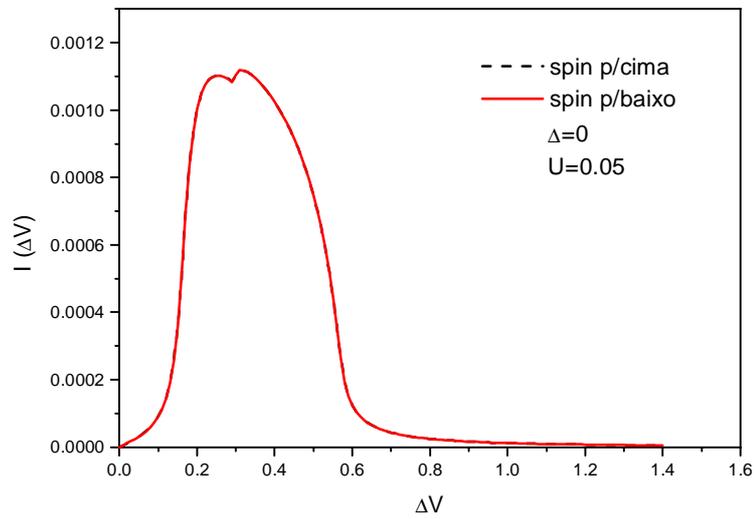
spin para cima, quanto spin para baixo possuem exatamente o mesmo comportamento de carga quando variamos a diferença de potencial. Apesar da interação coulombiana causar um desdobramento nas energias do estado localizado, elétrons com spins opostos podem ocupar exatamente o mesmo nível de energia (separadamente).

Além de não polarizar a carga, a interação coulombiana também não é eficiente na polarização da corrente, como pode ser visto na fig.(3.13).

3.2.4 Efeito do campo magnético na ausência de correlação

Até este momento, não houve uma separação de spins tanto na carga quanto na corrente neste estudo de sistema longe do equilíbrio com a aplicação de um campo elétrico intenso. Mas, ao ser aplicado um campo magnético, devido ao efeito Zeeman, podemos notar drásticas mudanças em relação a essa característica.

Analisando o comportamento da carga em função da diferença de potencial aplicada, como mostra a fig.(3.14), observamos uma separação entre as cargas de diferentes spins.

Figura 3.12: Carga versus diferença de potencial para o caso $U = 0.05$ e $\Delta = 0$.Figura 3.13: Corrente versus diferença de potencial para o caso $U = 0.05$ e $\Delta = 0$.

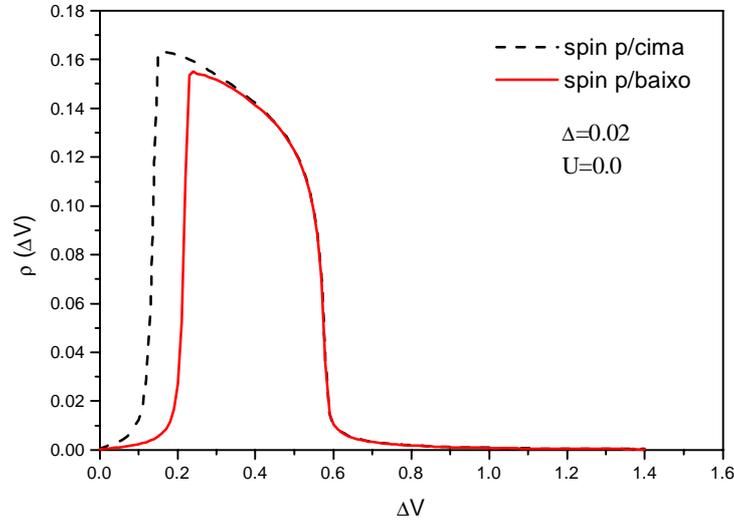


Figura 3.14: Carga versus diferença de potencial para o caso $U = 0$ e $\Delta = 0.02$.

A carga com spin para cima que ocupa o estado localizado do PQ de menor energia é a primeira a ocupar o PQ. À medida que V_g aumenta, esta carga que penetrou no PQ impede que a outra carga de spin oposto (spin para baixo) entre no PQ, devido ao princípio de exclusão de Pauli.

Uma solução que poderia ser usada como alternativa para a entrada desta carga, seria simplesmente fornecer mais energia para o sistema aumentando a diferença de potencial, mas isso não pode ter efeito prático neste caso, pois como vimos anteriormente, quando $\varepsilon_{PQ} < -2.0$ não existe mais a possibilidade de transmissão.

Comportamento semelhante também é visto na análise da corrente (ver fig.(3.15)). Existe a separação entre corrente com spin para cima e para baixo.

3.2.5 Efeito de correlação e campo magnético finito

Ao considerarmos a interação coulombiana em separado, vimos que esta sozinha não causa uma separação entre spin para cima e para baixo, também foi visto que apenas o

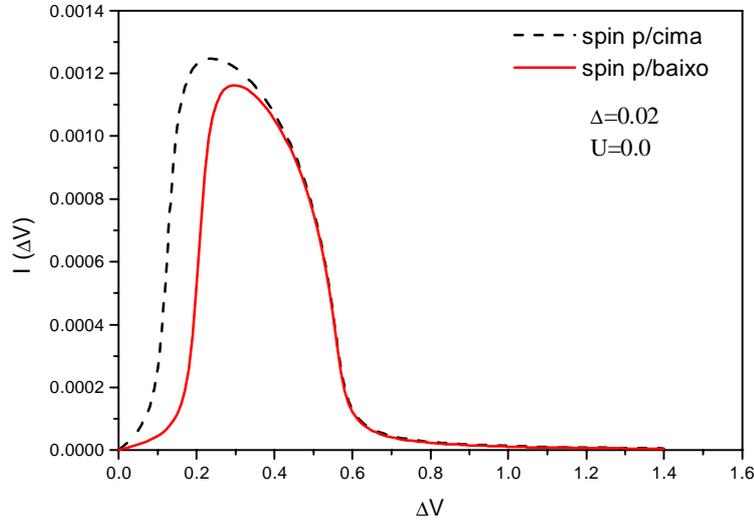


Figura 3.15: Corrente versus diferença de potencial para o caso $U = 0$ e $\Delta = 0.02$.

campo magnético é capaz de causar tal separação. No entanto a interação coulombiana tem como efeito o surgimento de dois picos para cada spin, conforme estudo com campo elétrico infinitesimal.

Quando somado os efeitos de correlação e de um campo magnético finito (ver fig.(3.16) e fig.(3.18)), observamos a polarização da carga devido ao efeito do campo magnético e como consequência da interação coulombiana, o início do surgimento de um segundo pico em cada spin tanto no gráfico da carga, quanto no da corrente. Para ressaltar este efeito da correlação, aumentamos a interação coulombiana para $U = 0.1$ e mantivemos o mesmo campo magnético. Esta situação pode ser vista nas figs.(3.17) e (3.19). Com uma correlação maior, fica mais evidente, principalmente em (3.19), o surgimento de mais um pico para cada tipo de spin.

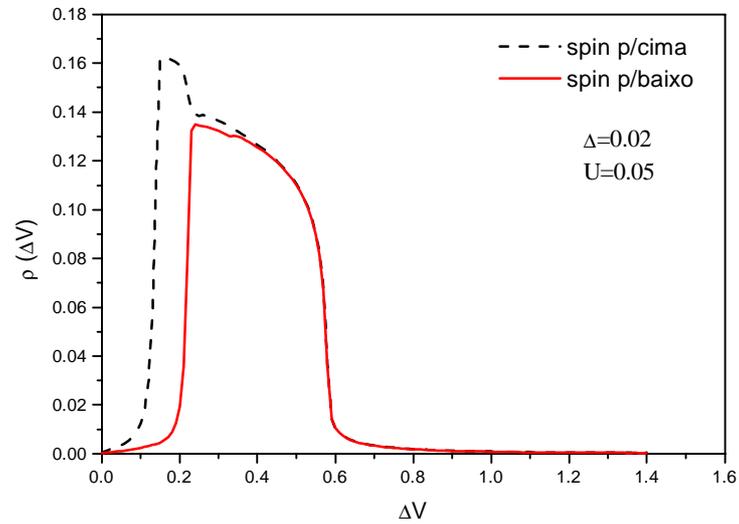


Figura 3.16: Carga versus diferença de potencial para o caso $U = 0.05$ e $\Delta = 0.02$.

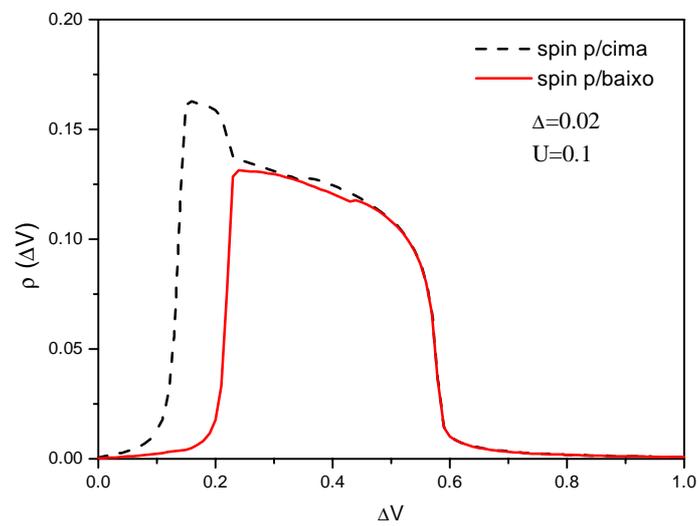
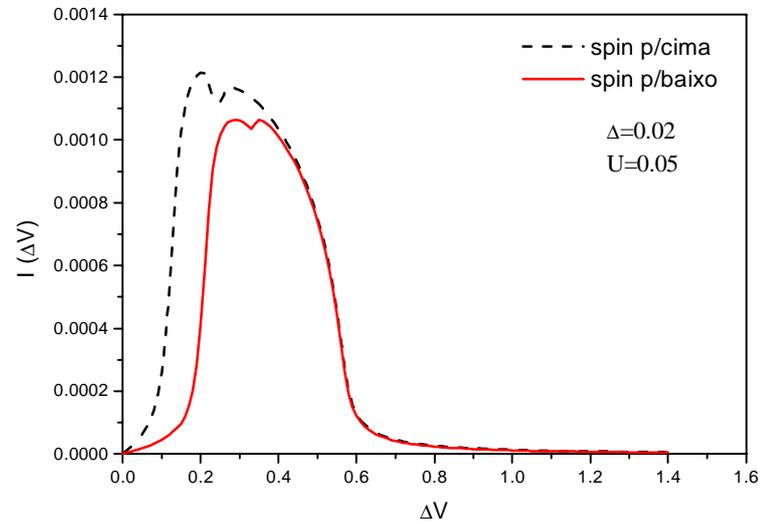
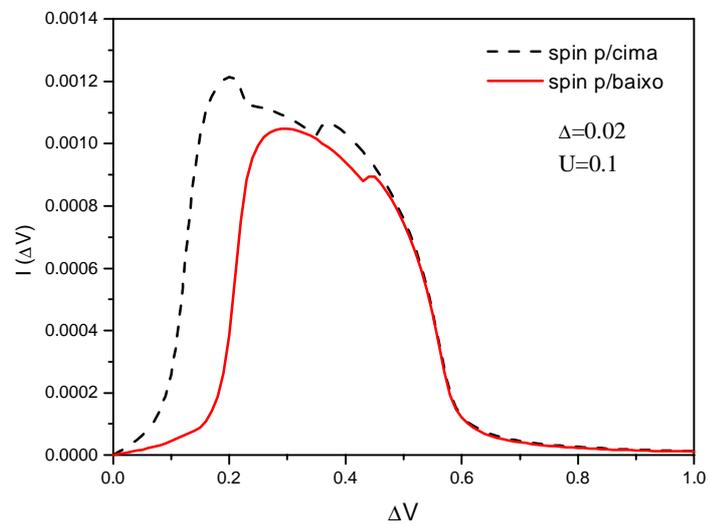


Figura 3.17: Carga versus diferença de potencial para o caso $U = 0.1$ e $\Delta = 0.02$.

Figura 3.18: Corrente versus diferença de potencial para o caso $U = 0.05$ e $\Delta = 0.02$.Figura 3.19: Corrente versus diferença de potencial para o caso $U = 0.1$ e $\Delta = 0.02$.

