

4 Fenômenos Temporais

Neste capítulo iremos desenvolver um estudo detalhado da evolução temporal da carga e do spin em um sistema composto por um PQ ligado a dois contatos. Nossa intenção é criar um modelo para a leitura de informação, utilizando o grau de liberdade do spin eletrônico. Ou seja, um modelo que seja capaz de gravar um elétron com determinado spin no PQ e, em um segundo momento, que consiga ler essa informação gravada. Para este estudo são muito importantes os tempos envolvidos nos processos de leitura, comparativamente ao tempo de decoerência do spin, este último correspondendo à fidelidade da memória.

Recentemente, fenômenos relacionados ao spin têm sido objeto de estudos teóricos e experimentais¹⁸. A relação entre o acoplamento spin-órbita e o confinamento quântico em heteroestruturas semicondutoras fornece uma ferramenta importante para a manipulação do grau de liberdade de spins dos elétrons, através do acoplamento com o grau de liberdade orbital. Por outro lado, os efeitos da correlação eletrônica em transporte em PQ's sob a influência de um potencial externo têm causado grande interesse^{19,20}. No nosso caso, estudaremos o papel fundamental que a interação eletrônica tem no processo de guardar a informação contida no spin em um sistema altamente confinado, como é o caso de um PQ.

4.1 Equação de movimento do pacote

Já foi mostrado no capítulo anterior que a física associada a um PQ conectado a dois terminais pode ser compreendida em termos do hamiltoniano de Anderson para uma impureza, onde o próprio PQ faz o papel da impureza. O hamiltoniano deve ser compatível com aquele da eq. (2.4). Podemos escrevê-lo novamente utilizando uma base de ligações fortes e restringindo as interações a primeiros vizinhos:

$$\begin{aligned}
 H = & \sum_{i\sigma} \varepsilon_{i\sigma} n_{i\sigma} + \sum_{i\sigma} t_i (c_{i+1\sigma}^+ c_{i\sigma} + hc.) \\
 & + \sum_{i\sigma} t_{soi} (\bar{\sigma} c_{i+1\sigma}^+ c_{i\bar{\sigma}} + hc.) + U n_{o\uparrow} n_{o\downarrow},
 \end{aligned} \tag{4.1}$$

onde $c_{i\sigma}^+$ e $c_{i\sigma}$ são os operadores de criação e destruição de um elétron com spin σ no sítio i , $t_i = t_{i,i+1}$ e $\varepsilon_{i\sigma}$ é a energia do sítio, que leva em conta o potencial externo. O PQ está localizado no sítio $i = 0$ e t_{so_i} é o parâmetro do acoplamento spin-órbita causado pelo efeito Rashba.

Trataremos a interação coulombiana usando a aproximação de Hubbard. Esta aproximação elimina todas as excitações de baixa energia, tipo efeito Kondo, mas considera adequadamente as de maior energia envolvidas no bloqueamento de Coulomb. Para estudar as propriedades temporais do sistema, usamos o conjunto de funções de Wannier, cada uma delas localizada num sítio da rede de spin σ , $|i\sigma\rangle$. Para $i = 0$ temos, além dos dois estados $|0\sigma\rangle$, o estado $|\bar{0}\rangle$ que tem dois elétrons no sítio $i = 0$, com spins opostos. Podemos escrever a solução da equação de Schrödinger do hamiltoniano (4.1) como uma combinação linear destas funções,

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_i a_{i\sigma}(t) |i\sigma\rangle + a_{\bar{0}}(t) |\bar{0}\rangle, \quad (4.2)$$

onde, em geral, as amplitudes de Wannier dependem explicitamente do tempo. Para encontrar a dependência temporal destas amplitudes devemos resolver as equações de movimento que regem a sua dinâmica. A dificuldade na solução deste problema provém dos termos derivados da interação coulombiana que produz bifurcações no sítio do PQ

A solução formal para a equação de Schrödinger,

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = H\Psi, \quad (4.3)$$

é

$$\Psi(x, t) = e^{-i\hbar H t} \Psi(x, 0), \quad (4.4)$$

correspondente ao operador evolução temporal, que leva a função de onda do tempo 0 ao tempo t . Desenvolvendo a expressão em série, implícita na forma exponencial para este operador da evolução, temos que, até a primeira ordem em δt , ele pode ser aproximado por:

$$e^{-iH\delta t} \simeq 1 - i\hbar H \delta t. \quad (4.5)$$

De (4.4) e (4.5) obtemos,

$$\Psi(x, t + \delta t) = (1 - i\hbar H \delta t) \Psi(x, t), \quad (4.6)$$

e discretizando o tempo $t = n\delta t$.

$$\Psi^{n+1} = \Psi^n - i\delta t H \Psi^n \quad (4.7)$$

que é uma expressão explícita onde o supraíndice n indica o tempo.

No entanto, uma opção mais interessante é usarmos a expressão:

$$e^{-iH\delta t} \simeq \frac{(1 - \frac{1}{2}i\hbar H\delta t)}{(1 + \frac{1}{2}i\hbar H\delta t)} \quad (4.8)$$

Esta última aproximação tem a vantagem de poder ser iterada para simular a evolução da função de onda. É fácil ver que esta é exata até os termos proporcionais a $(H\delta t)^2$, o que é importante do ponto de vista numérico para a conservação da norma. Temos então que:

$$\Psi(x, \delta t) = \frac{(1 - \frac{1}{2}i\hbar H\delta t)}{(1 + \frac{1}{2}i\hbar H\delta t)} \Psi(x, 0). \quad (4.9)$$

Logo, para a n -ésima iteração,

$$\left(1 + \frac{1}{2}i\hbar H\delta t\right) \Psi^{n+1} = \left(1 - \frac{1}{2}i\hbar H\delta t\right) \Psi^n \quad (4.10)$$

Substituindo (4.2) em (4.3) obtemos,

$$i\hbar \sum_{i\sigma} \frac{d}{dt} a_{i\sigma}(t) |i\sigma\rangle = \sum_{i\sigma} a_{i\sigma}(t) H |i\sigma\rangle \quad (4.11)$$

multiplicando por $\langle j\sigma'|$, temos:

$$i\hbar \sum_{i\sigma} \frac{d}{dt} a_{i\sigma}(t) \langle j\sigma' | i\sigma\rangle = \sum_{i\sigma} a_{i\sigma}(t) \langle j\sigma' | H | i\sigma\rangle \quad (4.12)$$

$$i\hbar \sum_{i\sigma} \frac{d}{dt} a_{i\sigma}(t) \delta_{ij} \delta_{\sigma\sigma'} = \sum_{i\sigma} a_{i\sigma}(t) H_{ij}^{\sigma\sigma'}, \quad (4.13)$$

onde

$$H_{ij}^{\sigma\sigma'} \equiv \langle i\sigma | H | j\sigma' \rangle \quad (4.14)$$

Logo,

$$i\hbar \frac{d}{dt} a_{j\sigma'}(t) = \sum_{i\sigma} H_{ij}^{\sigma\sigma'} a_{i\sigma}(t) \quad (4.15)$$

Estamos interessados em calcular para $j, i \neq 0, 1, \bar{1}$.

Temos que

$$c_{l\sigma^n} |j\sigma'\rangle = \delta_{lj} \delta_{\sigma^n\sigma'} |0\rangle, \quad (4.16)$$

e, analogamente,

$$\langle i\sigma | c_{l\sigma^n}^+ = (c_{l\sigma^n} |i\sigma\rangle)^+ = \delta_{li} \delta_{\sigma^n\sigma'} \langle 0| \quad (4.17)$$

onde $|0\rangle$ é o estado fundamental do sistema.

Portanto o primeiro termo do hamiltoniano na eq. (4.14) é:

$$\begin{aligned} \sum_{l\sigma^n} \varepsilon_{l\sigma^n} \langle i\sigma | c_{l\sigma^n}^+ c_{l\sigma^n} |j\sigma'\rangle &= \sum_{l\sigma^n} \varepsilon_{l\sigma^n} \delta_{lj} \delta_{\sigma^n\sigma'} (\delta_{li} \delta_{\sigma^n\sigma'} \langle 0| 0\rangle) \\ &= \varepsilon_{j\sigma'} \delta_{ji} \delta_{\sigma'\sigma} \end{aligned} \quad (4.18)$$

O segundo termo é:

$$\begin{aligned} \sum_{l\sigma^n} t_l \langle i\sigma | c_{l+1\sigma^n}^+ c_{l\sigma^n} |j\sigma'\rangle &= \sum_{l\sigma^n} t_l \delta_{l+1j} \delta_{\sigma^n\sigma'} (\delta_{li} \delta_{\sigma^n\sigma'} \langle 0| 0\rangle) \\ &= t_{j-1} \delta_{j-1i} \delta_{\sigma'\sigma} \end{aligned} \quad (4.19)$$

Substituindo estes termos em 4.15 a contribuição é

$$i\hbar \frac{d}{dt} a_{j\sigma'}(t) = \sum_{i\sigma} H_{ij}^{\sigma\sigma'} a_{i\sigma}(t) = \varepsilon_{j\sigma'} a_{j\sigma'} + t_{j-1} a_{j-1\sigma'} + \dots \quad (4.20)$$

Renomeando $j \rightarrow i$, $\sigma' \rightarrow \sigma$, obtemos:

$$i\hbar \frac{d}{dt} a_{i\sigma} = \varepsilon_{j\sigma} a_{j\sigma} + t_{i-1} a_{i-1\sigma} + t_i a_{i+1\sigma} + t_{s_{oi}-1} a_{i-1\bar{\sigma}} + t_{s_{oi}} a_{i\bar{\sigma}} \quad i \neq 0, 1, \bar{1} \quad (4.21)$$

A função de Green do hamiltoniano de Hubbard para um único estado $|0\rangle$, de energia E_0 , tomando a média sobre os números de ocupação, é:

$$g_\sigma = \frac{1 - n_{\bar{\sigma}}}{\varepsilon - E_0} + \frac{n_{\bar{\sigma}}}{\varepsilon - (E_0 + U)} \quad (4.22)$$

Podemos ver também na literatura^{37,38} que se tivermos uma configuração de estados conforme fig.(4.1), os estados intermediários de energia E_m podem ser dizimados, levando ao sistema da fig.(4.2).

As energias e o hopping renormalizados são dados por:

$$\tilde{\varepsilon}_{\bar{1}} = \varepsilon_{\bar{1}} + \sum_m v_{\bar{1}m} g_m v_{m\bar{1}}, \quad (4.23)$$

$$\tilde{\varepsilon}_1 = \varepsilon_1 + \sum_m v_{1m} g_m v_{m1}, \quad (4.24)$$

$$\tilde{v}_{\bar{1}1} = \sum_m v_{\bar{1}m} g_m v_{m1}, \quad (4.25)$$

com, as funções de Green despidas dos sítios m .

$$g_m = \frac{1}{\varepsilon - E_m}$$

Vemos então que o sistema da fig.(4.4) com g_σ dado pela (4.22), é matematicamente equivalente ao sistema da fig.(4.5), pois para ambos os casos temos:

$$\tilde{\varepsilon}_{\bar{1}} = \varepsilon_{\bar{1}} + t'^2 \left(\frac{1 - n_{\bar{\sigma}}}{\varepsilon - E_0} + \frac{n_{\bar{\sigma}}}{\varepsilon - (E_0 + U)} \right) \quad (4.26)$$

$$\tilde{\varepsilon}_1 = \varepsilon_1 + t'^2 \left(\frac{1 - n_{\bar{\sigma}}}{\varepsilon - E_0} + \frac{n_{\bar{\sigma}}}{\varepsilon - (E_0 + U)} \right) \quad (4.27)$$

$$\tilde{v}_{\bar{1}1} = t'^2 \left(\frac{1 - n_{\bar{\sigma}}}{\varepsilon - E_0} + \frac{n_{\bar{\sigma}}}{\varepsilon - (E_0 + U)} \right) \quad (4.28)$$

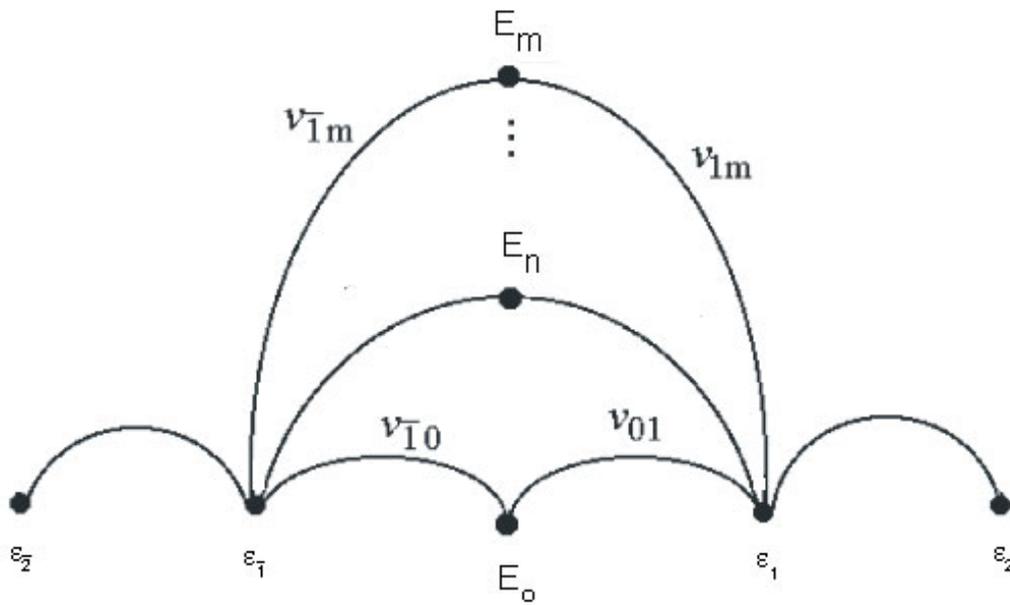


Figura 4.1: Configuração de estados de uma cadeia linear com estados intermediários.

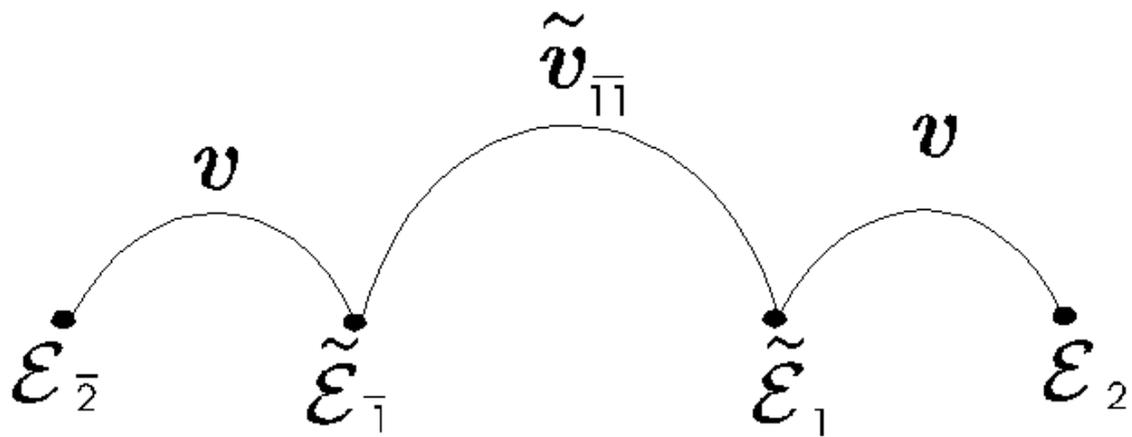


Figura 4.2: Configuração com o sistema dimerizado



Figura 4.3: Representação dos hoppings renormalizados.

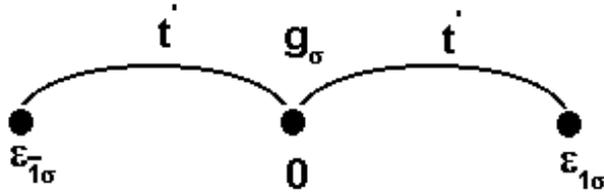


Figura 4.4: Esquema sintético de uma cadeia renormalizada.

Ao considerarmos a interação coulombiana, podemos dividir a amplitude de probabilidade em duas partes. A primeira referente a amplitude de probabilidade do elétron que ocupa o estado localizado de maior energia, $a_{0\sigma}$, e a outra referente ao de menor energia, $a_{o\sigma}$. Uma representação deste modelo pode ser vista na fig. (4.5).

$$i\hbar \frac{da_{0\sigma}}{dt} = (\epsilon_{0\sigma} + U) a_{0\sigma} + t' n_{\bar{\sigma}}^{1/2} (a_{1\bar{\sigma}} + a_{1\sigma}) + t_{so} n_{\bar{\sigma}}^{1/2} (a_{1\bar{\sigma}} + a_{1\sigma}), \quad (4.29)$$

$$i\hbar \frac{da_{o\sigma}}{dt} = \epsilon_{o\sigma} a_{o\sigma} + t' (1 - n_{\bar{\sigma}})^{1/2} (a_{1\bar{\sigma}} + a_{1\sigma}) + t_{so} (1 - n_{\bar{\sigma}})^{1/2} (a_{1\bar{\sigma}} + a_{1\sigma}), \quad (4.30)$$

$$i\hbar \frac{da_{1\sigma}}{dt} = \epsilon_{1\sigma} a_{1\sigma} + t a_{2\sigma} + t' \left[n_{\bar{\sigma}}^{1/2} a_{0\sigma} + (1 - n_{\bar{\sigma}})^{1/2} a_{o\sigma} \right] + t_{so} \left[n_{\bar{\sigma}}^{1/2} a_{0\bar{\sigma}} + (1 - n_{\sigma})^{1/2} a_{o\bar{\sigma}} \right], \quad (4.31)$$

e

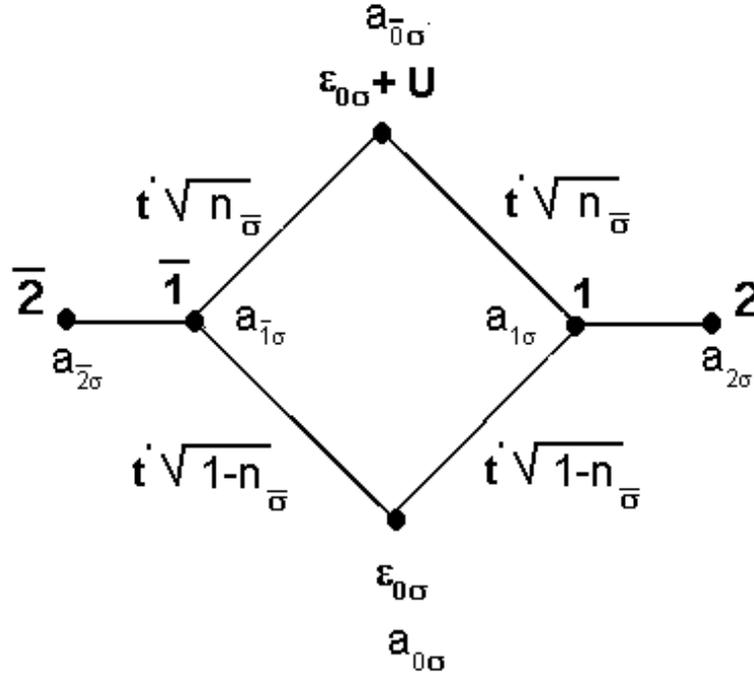


Figura 4.5: Modelo de sítios com apenas um canal de spin, contendo o PQ localizado no centro e suas energias desdobradas devido à interação coulombiana sem a presença de interação spin-órbita.

$$i\hbar \frac{da_{1\sigma}}{dt} = \epsilon_{1\sigma} a_{1\sigma} + t a_{2\sigma} + t' \left[n_{\bar{\sigma}}^{1/2} a_{\bar{0}\sigma} + (1 - n_{\bar{\sigma}})^{1/2} a_{0\sigma} \right] + t_{so} \left[n_{\sigma}^{1/2} a_{\bar{0}\bar{\sigma}} + (1 - n_{\sigma})^{1/2} a_{0\bar{\sigma}} \right], \quad (4.32)$$

onde n_{σ} é o número de elétrons com spin σ no PQ, calculado através das componentes da amplitude de probabilidade segundo a equação:

$$n_{\sigma} = |a_{0\sigma}|^2 + |a_{\bar{0}\sigma}|^2. \quad (4.33)$$

A solução destas equações também requer um resultado autoconsistente da carga do PQ, já que a eq. 4.3 depende de n_{σ} e $n_{\bar{\sigma}}$. Para cada instante de tempo o sistema de equações é resolvido. Uma vez obtido os valores para $a_{\bar{0},\sigma}$ e $a_{0,\sigma}$, o $n_{\bar{\sigma}}$ é substituído e novos valores de $a_{\bar{0}\sigma}$ e $a_{0\sigma}$ são obtidos, e assim sucessivamente, até conseguir para este determinado instante de tempo o valor da carga no PQ. Este resultado será utilizado como valor inicial para a obtenção num processo equivalente para um instante posterior.

A equação de movimento para $\Psi_\sigma(t)$ é então resolvida numericamente. O método é preciso e discretiza o operador derivada de tal forma que a iteração temporal é conservativa da norma. Este método está baseado na expressão (4.10).

Até este momento, representamos o sistema sem a interação spin-órbita. Ao incluirmos tal interação, a matriz hamiltoniana do sistema, considerando alguns sítios será dada por:

| | $\bar{1} \uparrow$ | $\bar{1} \downarrow$ | $\bar{0} \uparrow$ | $0 \uparrow$ | $\bar{0} \downarrow$ | $0 \downarrow$ | $1 \uparrow$ | $1 \downarrow$ |
|----------------------|---------------------------------|-----------------------------------|-------------------------------|--------------------------------|---------------------------------|--------------------------------|------------------------------|--------------------------------|
| $\bar{1} \uparrow$ | $\varepsilon_{\bar{1}\uparrow}$ | 0 | $t' n_{\downarrow}^{1/2}$ | $t' n_{\downarrow}^{+1/2}$ | $t_{so} n_{\uparrow}^{1/2}$ | $t_{so} n_{\downarrow}^{+1/2}$ | 0 | 0 |
| $\bar{1} \downarrow$ | 0 | $\varepsilon_{\bar{1}\downarrow}$ | $t_{so} n_{\downarrow}^{1/2}$ | $t_{so} n_{\downarrow}^{+1/2}$ | $t' n_{\uparrow}^{1/2}$ | $t' n_{\uparrow}^{+1/2}$ | 0 | 0 |
| $\bar{0} \uparrow$ | $t' n_{\downarrow}^{1/2}$ | $t_{so} n_{\downarrow}^{1/2}$ | $\varepsilon_{0\uparrow} + U$ | 0 | 0 | 0 | $t' n_{\downarrow}^{1/2}$ | $t_{so} n_{\downarrow}^{1/2}$ |
| $0 \uparrow$ | $t' n_{\downarrow}^{+1/2}$ | $t_{so} n_{\downarrow}^{+1/2}$ | 0 | $\varepsilon_{0\uparrow}$ | 0 | 0 | $t' n_{\downarrow}^{+1/2}$ | $t_{so} n_{\downarrow}^{+1/2}$ |
| $\bar{0} \downarrow$ | $t_{so} n_{\uparrow}^{1/2}$ | $t' n_{\uparrow}^{1/2}$ | 0 | 0 | $\varepsilon_{0\downarrow} + U$ | 0 | $t_{so} n_{\uparrow}^{1/2}$ | $t' n_{\uparrow}^{1/2}$ |
| $0 \downarrow$ | $t_{so} n_{\uparrow}^{+1/2}$ | $t' n_{\uparrow}^{+1/2}$ | 0 | 0 | 0 | $\varepsilon_{0\downarrow}$ | $t_{so} n_{\uparrow}^{+1/2}$ | $t' n_{\uparrow}^{+1/2}$ |
| $1 \uparrow$ | 0 | 0 | $t' n_{\downarrow}^{1/2}$ | $t' n_{\downarrow}^{+1/2}$ | $t_{so} n_{\uparrow}^{1/2}$ | $t_{so} n_{\uparrow}^{+1/2}$ | $\varepsilon_{1\uparrow}$ | 0 |
| $1 \downarrow$ | 0 | 0 | $t_{so} n_{\downarrow}^{1/2}$ | $t_{so} n_{\downarrow}^{+1/2}$ | $t' n_{\uparrow}^{1/2}$ | $t' n_{\uparrow}^{+1/2}$ | 0 | $\varepsilon_{1\downarrow}$ |

sendo $n_\sigma^{+1/2} \equiv (1 - n_\sigma)^{1/2}$

Substituindo os elementos de matriz, temos um sistema de bandas diagonais complexas para serem resolvidas para cada valor de tempo. Uma vez que as amplitudes de Wannier são conhecidas, a corrente é calculada da seguinte forma (conforme detalhado no apêndice B):

$$I_j = \frac{2e}{\hbar} \left\{ t \sum_{\sigma} \text{Im} (a_{j\sigma}^* a_{(j+1)\sigma}) + t_{so} \sum_{\sigma} \text{Im} (a_{j\sigma}^* a_{(j+1)\bar{\sigma}}) \right\}. \quad (4.34)$$

Por questão de simplicidade, escolhemos sítios para o cálculo da corrente onde a interação spin-órbita é nula. Desta forma, I_j é dada por:

$$I_j = \frac{2e}{\hbar} \left\{ t \sum_{\sigma} \text{Im} (a_{j\sigma}^* a_{(j+1)\sigma}) \right\}. \quad (4.35)$$

O sistema por nós estudado consiste em dois canais correspondentes a elétrons com spins diferentes, sendo que no canal de cima circulam elétrons com spin para baixo e no de

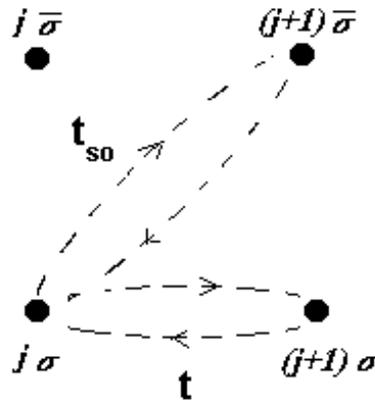


Figura 4.6: Modelo de sítios mostrando a possibilidade de troca de canais.

baixo elétrons com spin para cima. Estes dois canais, na ausência de interação spin-órbita, são independentes para todos os sítios, exceto no sítio do PQ, onde a circulação de spin $\uparrow(\downarrow)$, está condicionada pela interação coulombiana e pela ocupação ou não do PQ com elétrons de determinado spin $\downarrow(\uparrow)$. Quando o efeito spin-órbita é não nulo em alguma região do sistema, é então criada a possibilidade, dentro desta região, do elétron inverter seu spin, mudando de canal, conforme fig. (4.6). Na fig. (4.7) apresentamos um esquema sintético de nosso sistema na ausência de interação spin-órbita. A linha pontilhada desta e das figuras que seguem, indica que há uma influência da cadeia de spin σ sobre a de $\bar{\sigma}$, devido a autoconsistência da carga no sítio 0. Mostramos na fig. (4.8) as conexões entre os canais \uparrow e \downarrow , representados por t_{so} . É importante destacar que esta interação spin-órbita conecta o sítio genérico i de um dos canais (por exemplo \uparrow) com os sítios $i+1$ e $i-1$ do outro, de forma que a interação é não local.

Estamos interessados no comportamento temporal do transporte de um elétron injetado no sistema pela esquerda em $t=0$. O elétron incidente é representado por um pacote de ondas gaussiano, e nossa proposta é estudar dinamicamente como se produz a evolução deste pacote, em função da interação coulombiana U no PQ, da interação spin-órbita t_{so} , e em função das condições iniciais. A pacote está representado por,

$$\Psi(x, t=0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_0^2}} e^{-\frac{(x-x_0)^2}{2\sigma_0^2}} e^{-ik_0x}, \quad (4.36)$$

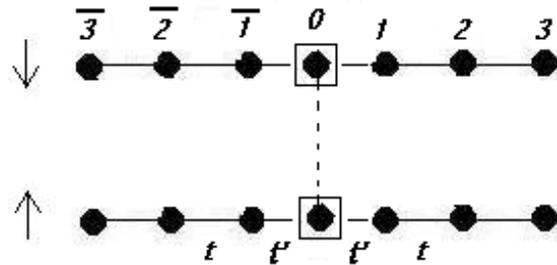


Figura 4.7: Modelo de sítios sem interação spin-órbita.

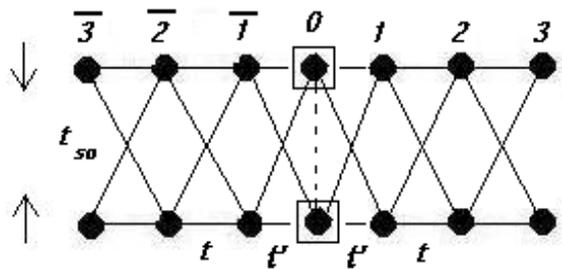


Figura 4.8: Modelo de sítios com interação spin-órbita.

onde os parâmetros relevantes são a localização x_0 , o momento eletrônico $\hbar k_0$ do elétron incidente em $t = 0$, e a flutuação na posição Δx , que será proporcional a σ_0 .

A potencialidade de ler a informação contida no spin da carga do PQ é desenvolvida quando a gaussiana que representa o elétron satisfaz as condições de ressonância. É nesta circunstância que a dinâmica do elétron incidente terá maior sensibilidade com respeito ao estado do PQ carregado, relevante no processo de leitura.

Para que ocorra tunelamento ressonante no PQ, devemos injetar um elétron representado por um pulso de onda, de energia cinética igual à energia do estado localizado do PQ, conforme aparece na fig. (4.9). Por outro lado, outra condição é que a largura da gaussiana tenha uma indeterminação na energia que seja da ordem da largura do estado localizado do PQ, que por sua vez vai depender da conexão do PQ com seus contatos.

Em relação à dispersão temos que: $\Delta x \Delta p \simeq \hbar/2$, $\Delta x \approx \sigma_0$, $\langle E \rangle = \hbar^2 \langle k^2 \rangle / 2m$. A

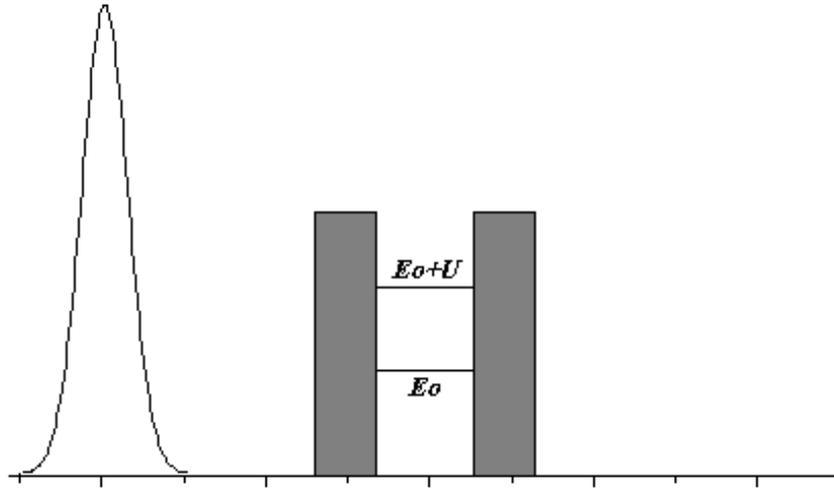


Figura 4.9: Modelo de tunelamento do pacote de onda.

energia ressonante do estado localizado no PQ e sua largura, renormalizados pela conexão com os contatos supondo $U = 0$, podem ser obtidas a partir de algumas considerações. O sistema é representado por um PQ conectado a duas semicadeias. Desta forma as funções de Green localizadas no PQ podem ser obtidas das seguinte equações:

$$G_{00} = g_0 + 2g_0 t' G_{10}, \quad (4.37)$$

$$G_{10} = \tilde{g}_1 t' G_{00}, \quad (4.38)$$

onde \tilde{g}_1 é a função de Green da semicadeia, antes de conectá-la ao PQ. Assim,

$$G_{00} = \frac{g_0}{1 - 2g_0 \tilde{g}_1 t'^2}, \quad (4.39)$$

sendo,

$$g_0 = \frac{1}{E - \varepsilon_0}, \quad (4.40)$$

$$\tilde{g}_1 = \frac{E \pm (E^2 - 4t^2)^{1/2}}{2t^2}. \quad (4.41)$$

sendo que o sinal $-$ vale para $E < -2t$ e o sinal $+$ para $E > -2t$.

Logo a função de Green vestida será,

$$G_{00} = \frac{1}{\left(1 - \frac{t'^2}{t^2}\right) \left(E - \frac{\varepsilon_0}{1-t'^2/t^2} \pm \frac{t'^2 \sqrt{E^2 - 4t^2}}{t^2(1-t'^2/t^2)}\right)}. \quad (4.42)$$

Temos um pólo em:

$$\tilde{\varepsilon}_0 = \frac{\varepsilon_0}{1 - t'^2/t^2}, \quad (4.43)$$

onde $\tilde{\varepsilon}_0$ é a energia renormalizada do sítio, devido aos contatos, sendo que sua largura vem dada por,

$$\Gamma = \frac{t'^2}{t^2(1 - t'^2/t^2)} \sqrt{\frac{\varepsilon_0^2}{(1 - t'^2/t^2)} - 4t^2}. \quad (4.44)$$

Desta forma, quando se faz incidir um elétron representado por uma gaussiana, conforme eq. (4.36), este estará em ressonância com as condições impostas pelo PQ quando $k_0^2 = 2m\tilde{\varepsilon}_0/\hbar^2$ e $\sigma_0 = \frac{2\hbar}{\Gamma} \sqrt{2\tilde{\varepsilon}_0/m}$.

4.2 Resultados

4.2.1 Controle de polarização com $U = 0$

Em um primeiro momento estudaremos um sistema composto por dois canais, cada um deles contendo 400 sítios, como mostrado na fig. (4.10). Admitiremos inicialmente que não existe PQ em nossa cadeia, mas é bom deixar claro, que todas as vezes que introduzirmos o PQ, este estará localizado no sítio 200, ou seja, exatamente no centro do sistema. Iremos supor que a repulsão coulombiana é nula, $U = 0$. Para demonstrar a dinâmica da carga ao longo da cadeia, na fig. (4.11) apresentamos um pacote de onda spin-polarizado percorrendo o sistema. A gaussiana em linhas pontilhadas, à esquerda,

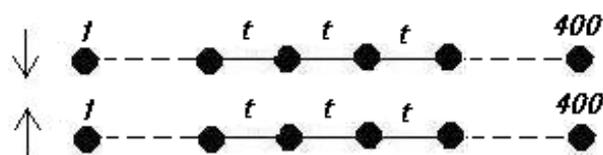


Figura 4.10: Os canais de spin desacoplados.

representa a carga no instante inicial centralizada no sítio 70. A evolução temporal a leva no instante τ para o sítio 330, o que é representado pela gaussiana contínua em vermelho. Para este cálculo usamos como passo temporal $dt = 10^{-4}ps$, e $nc = 500$ (número total de iterações no tempo). Esta situação pode ser simulada considerando unitário o elemento de matriz que liga cada sítio aos seus vizinhos, eliminando assim a reflexão da carga em todos os pontos do sistema. Apesar de não haver reflexão, se deixarmos a função de onda se propagar no tempo, ela irá aumentar sua largura devido às diferentes velocidades de cada seção do pacote, como é discutido nos livros de mecânica quântica introdutórios. Ao longo de nosso estudo, poderemos desconsiderar esta relaxação, visto que estamos trabalhando com tempos pequenos, tornando este fenômeno não importante para nossos cálculos, como aparece para uma situação típica na fig. (4.11), onde representamos a densidade de carga $\rho(x) = e |\Psi(x,t)|^2$, nos instantes inicial, $t = 0$, e final, $t = \tau$, da evolução.

Introduzindo o PQ no centro da cadeia, e escolhendo $t' = 0.45$ de modo tal que a função de onda possua energia cinética em ressonância com o estado localizado, torna-se possível o efeito de tunelamento, onde quase a totalidade da carga atravessa o PQ. Note que apenas uma pequena parte do pacote é refletido, como pode ser visto na figura (4.12), sendo que a linha tracejada representa a função de onda inicial e a linha contínua, a função de onda no tempo τ . Para enfatizar a carga refletida pelo PQ, ampliamos a fig. (4.12) entre os sítios 100 e 200, que está apresentada na fig. (4.13). Parte do pacote tem $k > k_0$ e a outra $k < k_0$. Para $k = k_0$ não há reflexão (seta na figura), a parte com $k > k_0$ viaja (para trás) mais depressa que a de $k < k_0$.

Devemos neste momento, por uma questão de completeza, analisar um caso fora de ressonância, ou seja, quando a energia do elétron representado pelo pacote de onda não coincide com a energia do estado localizado. Desta forma, o elétron não consegue

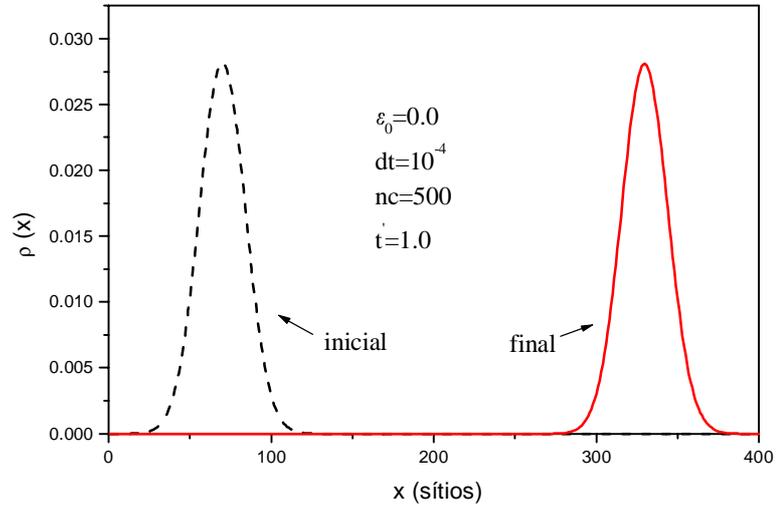


Figura 4.11: Evolução temporal do pacote sem PQ.

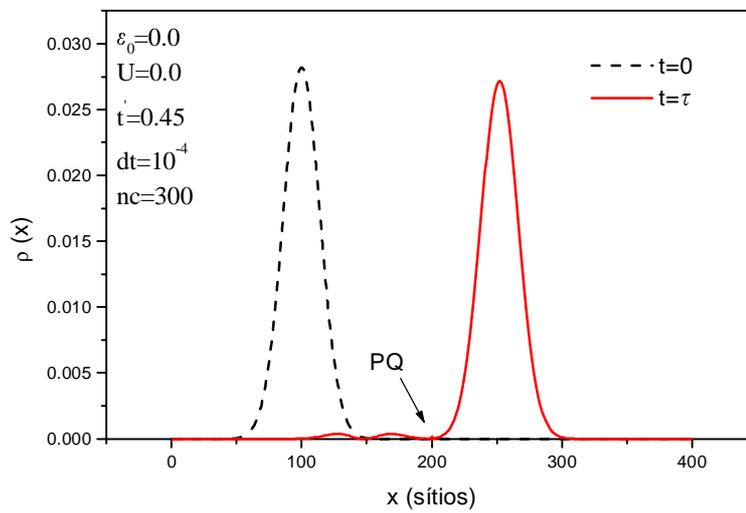


Figura 4.12: Efeito de tunelamento do pacote de onda na presença de um PQ localizado no centro da cadeia.

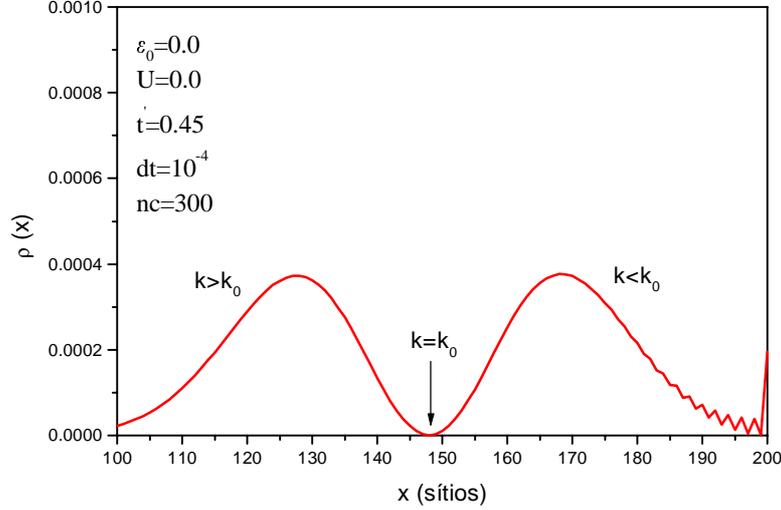


Figura 4.13: Parte do pacote que foi refletido.

ultrapassar a barreira imposta pelo PQ, causando a reflexão completa da carga, conforme fig. (4.14).

Para fazer um estudo aprofundado da polarização em função da interação spin-órbita, iremos injetar uma onda totalmente polarizada (spin para cima) em nosso sistema. Definimos o coeficiente de transmissão dependente do spin do elétron que atravessou o PQ, da seguinte forma:

$$T^\sigma(t_{so}) = \frac{\sum_{l=m+1}^N |a_{l\sigma}(\tau)|^2}{\sum_{l=0}^{m-1} |a_{l\uparrow}(0)|^2}, \quad (4.45)$$

onde $N = 400$ é o número total de sítios e $m = 200$ é o sítio em que o PQ está localizado (centro da cadeia). O tempo τ é aquele decorrido para que o pacote proveniente da esquerda, já tenha atravessado toda a região onde existe o efeito spin-órbita e o pacote de onda está normalizado, ou seja, $\sum_{l=0}^{m-1} |a_{l\uparrow}(0)|^2 = 1$ (colocamos no denominador apenas para evidenciar que estamos calculando a transmissão de uma onda inicialmente polarizada com spin para cima).

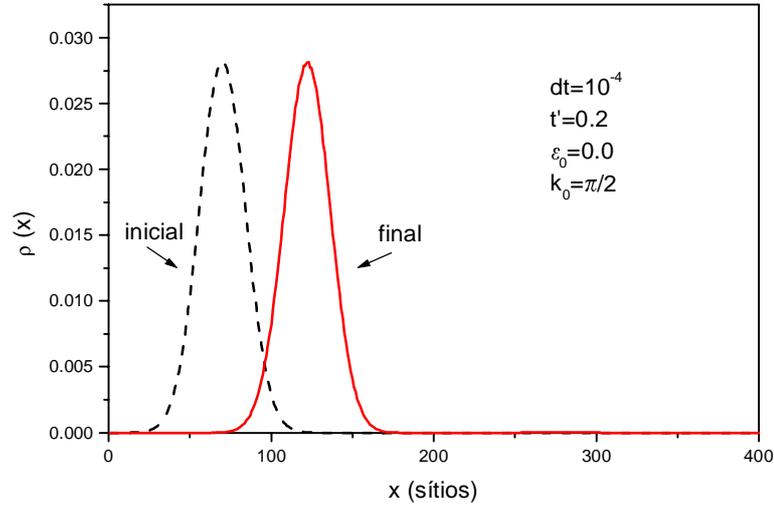


Figura 4.14: Reflexão total do pacote de onda, condições que não permitem tunelamento.

Poderemos estudar integralmente quais são os efeitos da variação dos parâmetros por nós adotados sobre a carga incidente no sistema e com isso controlar a polarização do pacote de onda após o tunelamento. O primeiro caso a ser analisado será o do sistema sem o PQ, e com interação spin-órbita existente entre os sítios 199 e 201, conforme esquema da fig. (4.15).

Para tal caso, calculamos o coeficiente de transmissão apresentado na fig. (4.16). A interação spin-órbita produz dois efeitos sobre o elétron. Por um lado aumenta a proporção de “spin flip” conforme a intensidade do efeito Rashba aumenta, como esperado. Por outro, reduz a densidade de carga que é transmitida além da região onde a interação atua, uma manifestação de que, inclusive na ausência do PQ, parte do pacote incidente é refletido, já que a região de $t_{so} \neq 0$ constitui um centro espalhador para o elétron incidente.

Inserindo o PQ no centro de nossa cadeia, conforme fig. (4.17), e fazendo com que os elementos de matriz que ligam o PQ sejam ideais para que ocorra tunelamento ($t' = 0.45$), o resultado é mostrado na fig. (4.18). Podemos concluir que a presença do PQ torna mais eficiente o processo de “spin flip”, existindo valores ($t_{so} > 0.8$) para os quais a polarização inicial será completamente invertida, embora este processo tenha

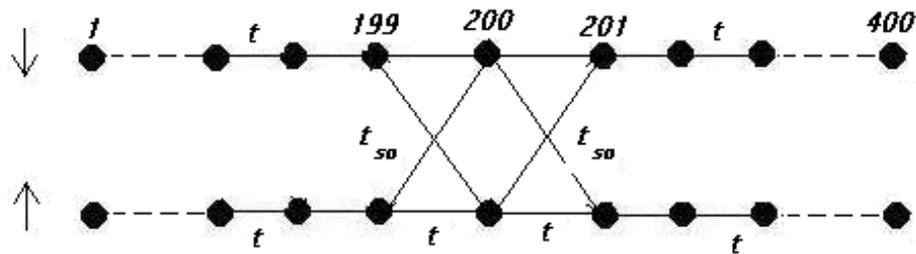


Figura 4.15: Interação spin-órbita entre os sítios 199 e 201.

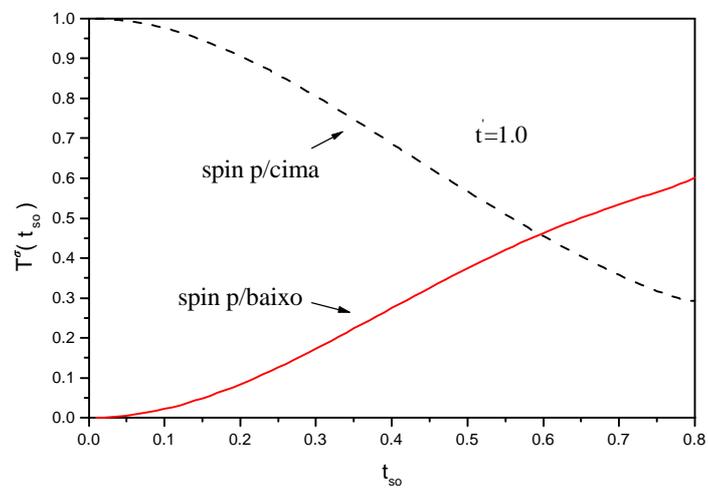


Figura 4.16: Coeficiente de transmissão da carga em função da interação spin-órbita.

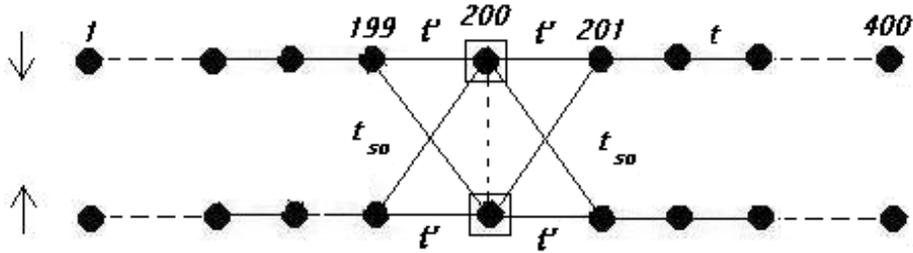


Figura 4.17: Modelo de sítios com interação spin-órbita.

como resultado também uma perda de intensidade de corrente transmitida.

Diminuindo ainda mais a dispersão na energia do PQ, isto é, adotando $t' = 0.1$, como na fig. (4.19), este fenômeno de inversão da polarização é conseguido para valores menores de t_{so} . O confinamento quântico decorrente da redução na dispersão da energia faz com que o elétron permaneça mais tempo no PQ, e como o efeito spin-órbita está praticamente restrito a ele, o resultado é um aumento dos efeitos desta interação.

Devemos agora analisar o caso em que a interação spin-órbita seja não nula em uma região finita de nossa cadeia, ao invés de apenas nos contatos com o PQ, para estudar como isso deve alterar o controle da polarização no sistema.

Consideramos, então uma cadeia constituída novamente de 400 sítios, com a interação spin-órbita, t_{so} , agindo entre os sítios 175 e 225, conforme fig. (4.20). Se excluirmos o PQ, isto é, supormos os elementos de matriz constantes e unitários ao longo de toda a cadeia, a dependência da polarização com a interação spin-órbita é apresentada na fig. (4.21).

Notam-se oscilações no coeficiente de transmissão que se devem ao fato do acoplamento spin-órbita se dar numa região finita. Entendemos este fenômeno da seguinte maneira: a interação spin-órbita cria a possibilidade do elétron mudar de um canal para o outro, ou seja, um elétron que está no canal de spin para cima passa por um determinado sítio da cadeia onde $t_{so} \neq 0$ e pula para o canal de spin para baixo, invertendo desta maneira sua polarização. À medida que a região que permite esta troca de canais aumenta, um elétron pode ficar se alternando entre estes canais. Desta forma podemos argumentar que quanto maior for a região, mais suscetível o elétron estará à variação da interação spin-órbita. Uma maneira alternativa de visualizar este processo seria um modelo em

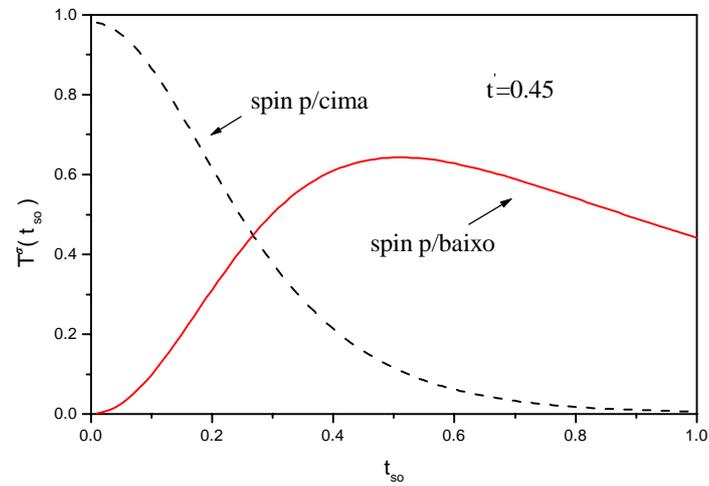


Figura 4.18: Coeficiente de transmissão da carga em função da interação spin-órbita sendo que o efeito spin-órbita está ligado entre o PQ e seus primeiros vizinhos e $t' = 0.45$, isto é, o pacote está em ressonância.

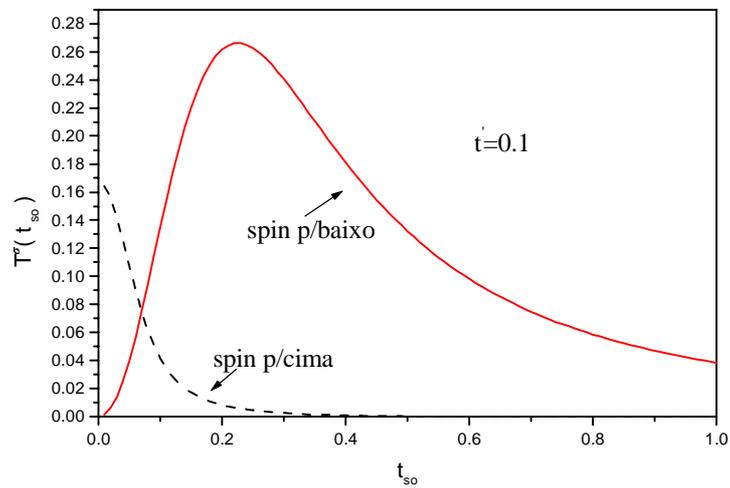


Figura 4.19: Coeficiente de transmissão da carga em função da interação spin-órbita sendo que o efeito spin-órbita está ligado entre o PQ e seus primeiros vizinhos e $t' = 0.1$.

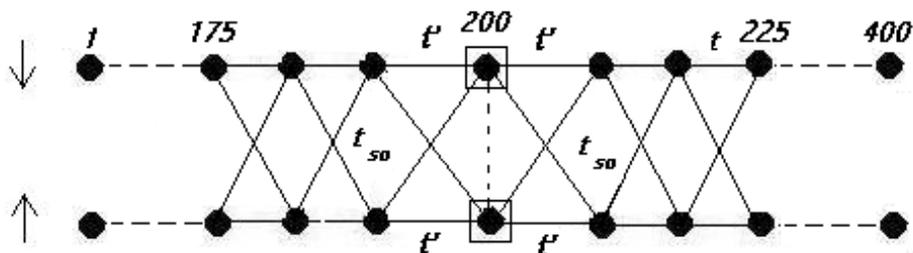


Figura 4.20: Modelo de sítios com interação spin-órbita entre os sítios 175 e 225.

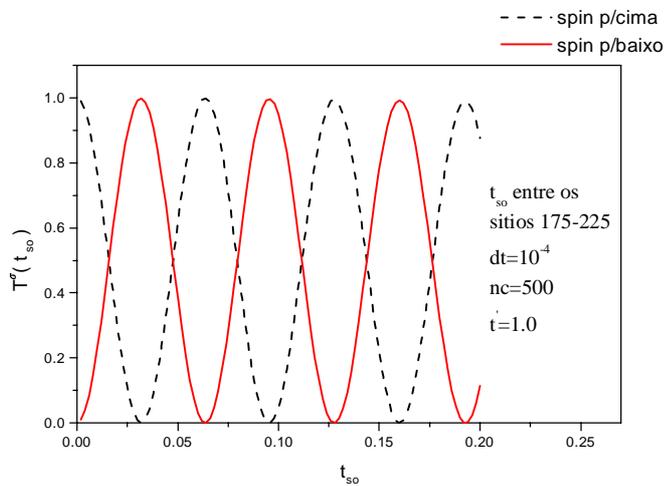


Figura 4.21: Coeficiente de transmissão da carga em função da interação spin-órbita sendo que o efeito spin-órbita está ligado entre os sítios 175 e 225 e $t' = 0.1$.

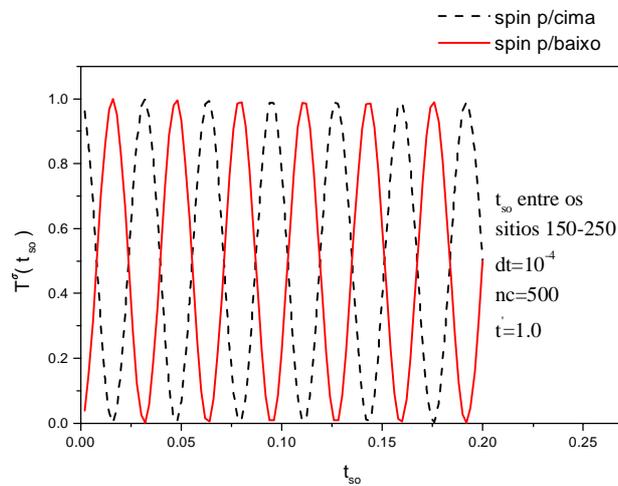


Figura 4.22: Coeficiente de transmissão da carga em função da interação spin-órbita sendo que o efeito spin-órbita está ligado entre os sítios 150 e 250 e $t' = 0.1$.

que a polarização do pacote de onda inicialmente polarizado, quando atravessa a região de interação spin-órbita, avança em forma de espiral, girando de forma a ter diferentes polarizações para cada valor de t_{so} .

Para testar este argumento, a região foi estendida entre os sítios 150 e 250. O resultado é apresentado na fig. (4.22). Podemos notar que realmente a susceptibilidade do elétron à interação spin-órbita aumenta a medida que a região de interação fica maior, tendo como consequência um maior número de oscilações no coeficiente de transmissão. Quanto maior a região onde $t_{so} \neq 0$, menor será a interação necessária para virar o spin do elétron.

Neste momento, faremos o mesmo cálculo do coeficiente de transmissão, mas desta vez com um PQ localizado no centro do sistema, ou seja, no sítio 200. Mostramos na fig. (4.23) a dependência do coeficiente de transmissão dependente do spin em função da interação spin-órbita, t_{so} , quando esta age entre os sítios 175 e 225 para um elemento de matriz no PQ igual a $t' = 0.45$, garantindo desta forma que ocorra tunelamento. Quando comparamos as figs. (4.21) e (4.23), notamos que a diferença entre elas é muito pequena, pois o pacote de onda está em ressonância e portanto a dupla barreira é quase transparente. Como demonstrado anteriormente, a polarização da carga transmitida neste caso (mesmo para $t_{so} = 0$) não é total, devido ao fato do PQ refletir uma pequena parte da

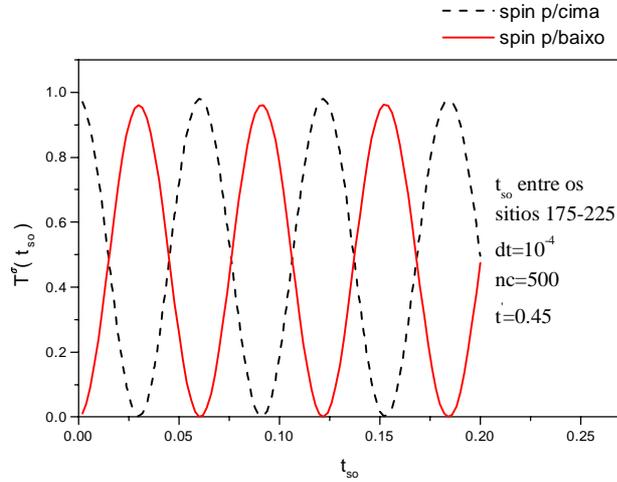


Figura 4.23: Coeficiente de transmissão da carga em função da interação spin-órbita sendo que o efeito spin-órbita está ligado entre os sítios 175 e 225 e $t' = 0.45$.

carga, conforme apresentado na fig. (4.13). Mais adiante introduziremos um mecanismo que aumentará essa reflexão.

De maneira análoga à anterior, agora na presença de um PQ, aumentamos a região em que a interação spin-órbita atua. A seguir, mostramos esse caso na fig. (4.25), onde a interação spin-órbita age entre os sítios 150 e 250, e analisamos a dependência do coeficiente de transmissão da carga em função de t_{so} para o mesmo elemento de matriz no PQ, ou seja, $t' = 0.45$. Fica evidente que a frequência com que o coeficiente de transmissão é alterado está intimamente ligada ao tamanho da região em que t_{so} não é nulo, conforme resultados na ausência do PQ. Quanto mais ligações existirem entre os canais de spin para cima e para baixo, maior será a troca de carga entre estes. No entanto, se compararmos os dois casos, com e sem o PQ, notamos que na presença do PQ o coeficiente de transmissão dependente do spin nunca terá valor unitário.

Devemos então analisar outro aspecto do nosso sistema de controle de transmissão dependente do spin. Como o sistema se comporta quando aumentamos a intensidade do centro espalhador? Para responder esta questão, consideraremos que os elementos de matriz que ligam o PQ aos contatos são pequenos, quando comparados àqueles em que ocorre o melhor tunelamento. Tomamos como exemplo o caso em que $t' = 0.2$. Com isso, uma parte maior da carga é refletida no PQ. É interessante notar que neste caso, como

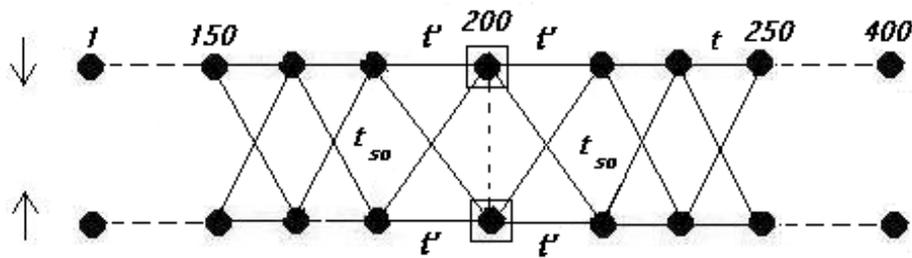


Figura 4.24: Modelo de sítios com interação spin-órbita entre os sítios 150 e 250.

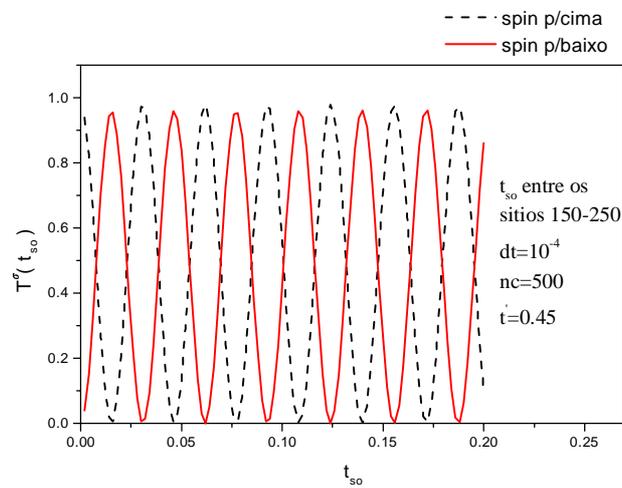


Figura 4.25: Coeficiente de transmissão da carga em função da interação spin-órbita sendo que o efeito spin-órbita está ligado entre os sítios 150 e 250 e $t' = 0.45$.

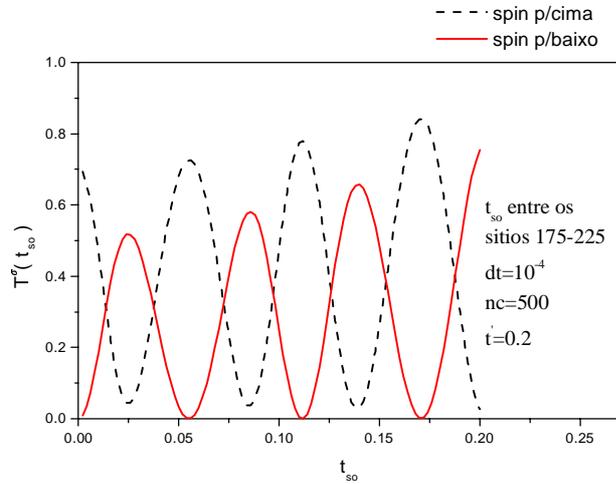


Figura 4.26: Coeficiente de transmissão da carga em função da interação spin-órbita sendo que o efeito spin-órbita está ligado entre os sítios 175 e 225 e $t' = 0.2$.

pode ser visto na fig. (4.26), à medida em que a interação spin-órbita aumenta, ocorre também um aumento nas alturas dos picos das polarizações. Isto se deve ao fato de que, para t_{so} mais altos, ocorre uma redução na reflexão produzida pelo PQ, ou seja, o elétron tem mais facilidade para mudar de canal do que permanecer no mesmo canal e vencer a barreira causada pelo PQ.

De maneira análoga às anteriores, apresentamos o coeficiente de transmissão quando $t_{so} = 0.2$ entre os sítios 150 e 250 da cadeia, fig. (4.27). Como era de se esperar, a frequência das oscilações do coeficiente de transmissão dependente do spin aumentam, como nos casos analisados acima.

Conforme comentado anteriormente, o confinamento faz com que o elétron permaneça mais tempo no PQ. Para comprovar esse fenômeno, fizemos um estudo da carga do PQ em função do tempo, mostrado na fig. (4.28), considerando a interação spin-órbita nula. À medida que o confinamento aumenta, ou seja, t' diminui, fica claro o aumento do tempo de permanência da carga no PQ. Além disso, podemos notar que a densidade de carga fica menor, devido ao fato de haver mais reflexão, pois a maior parte do pacote está fora de ressonância.

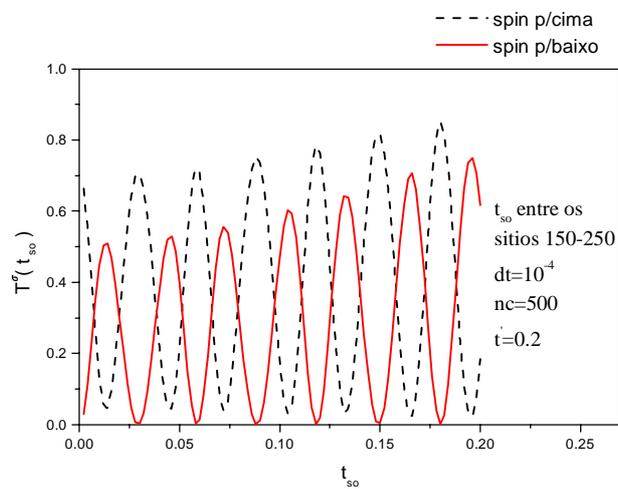


Figura 4.27: Coeficiente de transmissão da carga em função da interação spin-órbita sendo que o efeito spin-órbita está ligado entre os sítios 150 e 250 e $t' = 0.2$.

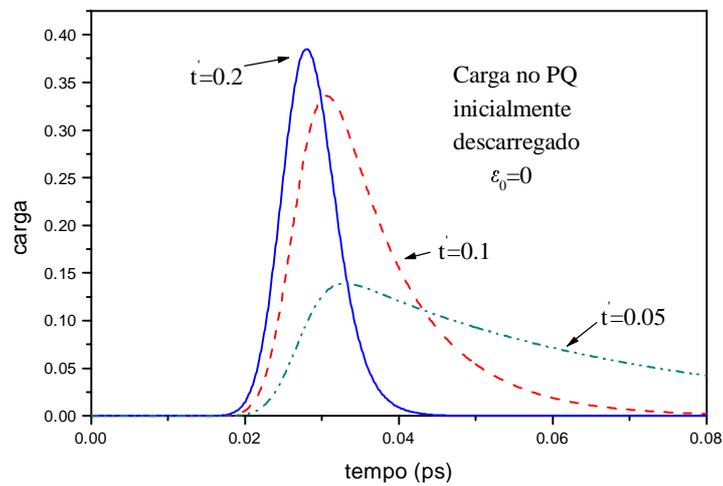


Figura 4.28: Evolução temporal da carga no ponto quântico.

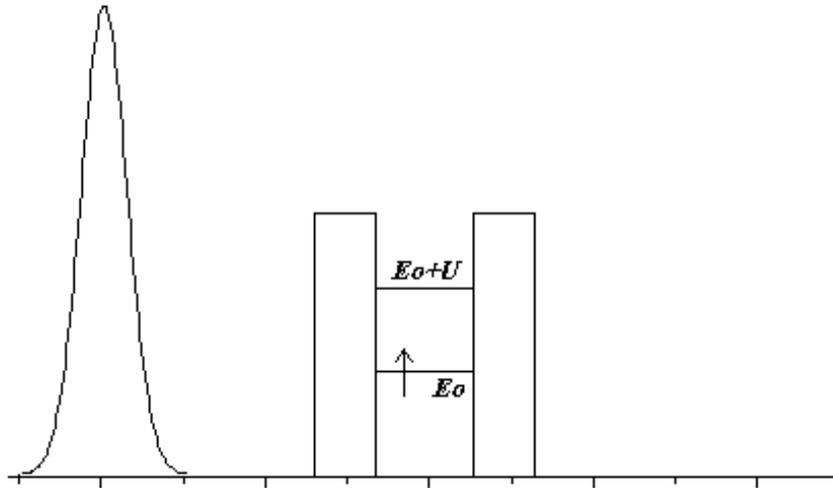


Figura 4.29: Representação de um pacote de onda emitido pelo lado esquerdo do sistema e de uma dupla barreira com dois estados localizados gerados pela interação Coulombiana.

4.2.2 Processo de leitura com $U \neq 0$

Com o intuito de criar um mecanismo de leitura no PQ, iremos agora populá-lo, inicialmente, com uma carga de spin para cima no estado localizado com energia ε_0 , conforme fig. (4.29), que mostra a situação no instante inicial. Analisamos a evolução temporal de pacotes injetados no sistema pela esquerda com energia $\varepsilon_0 + U$, isto é, em ressonância (fig. (4.30)), com diferentes polarizações de spin. Esperamos com isso selecionar a polarização da onda transmitida.

Como o PQ estará carregado com spin para cima, a carga com spin para baixo não deverá ser refletida por ele (exceto uma pequena parte, conforme mostrado na fig. (4.13), visto que não há motivos para isso ocorrer, já que todos os requisitos para o tunelamento estão preenchidos. Mas, em se tratando da carga com spin para cima, é esperado que esta não consiga tunelar devido ao princípio de exclusão de Pauli (PEP).

Usando este modelo, poderemos determinar qual carga está ocupando o PQ ou, analisando de outra forma, polarizar a corrente desejada no sistema, com a simples população de uma carga com spin definido no PQ, criando desta forma um perfeito sistema de leitura de informação com o uso de apenas um PQ.

Primeiramente estudamos um pacote de onda polarizado com spin para baixo

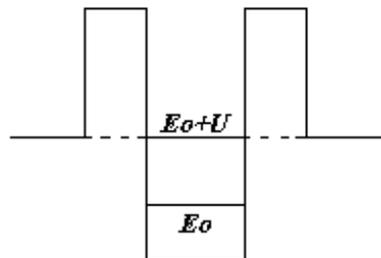


Figura 4.30: Diagrama de ressonância entre o pacote de onda e o PQ quando é aplicado um potencial de porta V_g .

injetado inicialmente com energia $\varepsilon_0 + U$ em direção ao PQ. Colocamos ε_0 abaixo da banda de condução para que não houvesse perda de carga. Nos gráficos que se seguem, apresentamos os resultados após 410 iterações no tempo, com intervalo de $10^{-4}ps$ para cada iteração. No primeiro caso, fig. (4.31), temos o tunelamento da carga com spin para baixo através do PQ. A partir deste ponto, as linhas tracejadas representam a função de onda no instante inicial e a contínua no final, ou seja, os gráficos que seguem são referentes a um determinado spin, para cima ou para baixo, em tempos diferentes.

Num segundo caso, mandamos a carga com spin para cima, com energia $\varepsilon_0 + U$, que é refletida devido ao PEP, mostrado na fig. (4.32), conforme esperávamos para nosso mecanismo de leitura.

Alguns comentários são pertinentes em relação à fig. (4.32). A altura do pacote de onda emitido pelo lado esquerdo no instante inicial permanece a mesma. Para comprovar isso, fizemos uma ampliação entre os sítios 20 e 190 (fig. (4.33)). Além disso, nota-se que no instante inicial representado pela linha tracejada já existe uma carga com spin para cima no PQ, como pode ser visto no sítio 200. Com o passar do tempo esta carga escoou para a cadeia através dos contatos. Nesse processo de leitura existem duas cargas no sistema, uma é o próprio pacote emitido e a outra é a carga com spin para cima colocada previamente no PQ.

A seguir apresentamos uma visão tridimensional do sistema acima. Na fig. (4.34) é mostrada a evolução temporal da carga com spin para cima, sendo um dos eixos o tempo. Ao alcançar o PQ esta carga irá sofrer reflexão total devido ao PEP, desde que uma carga com mesmo spin já existe no PQ.

Por outro lado, quando a carga incidente é de spin contrário ao previamente existente

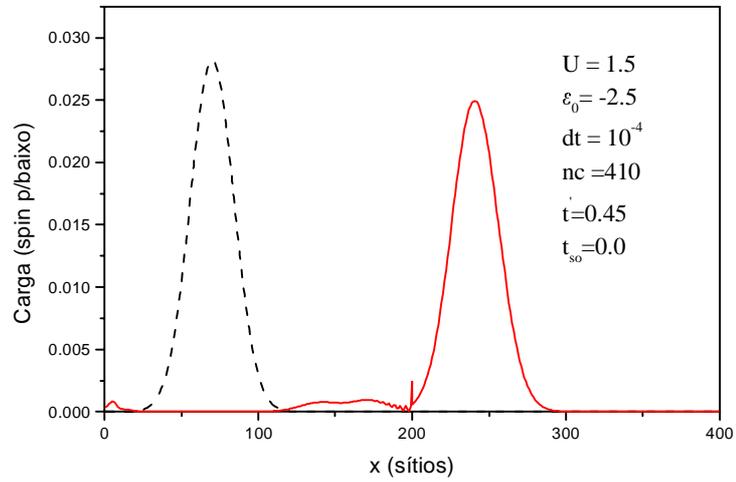


Figura 4.31: Evolução temporal da carga com spin para baixo quando o PQ está carregado com uma carga com spin para cima.

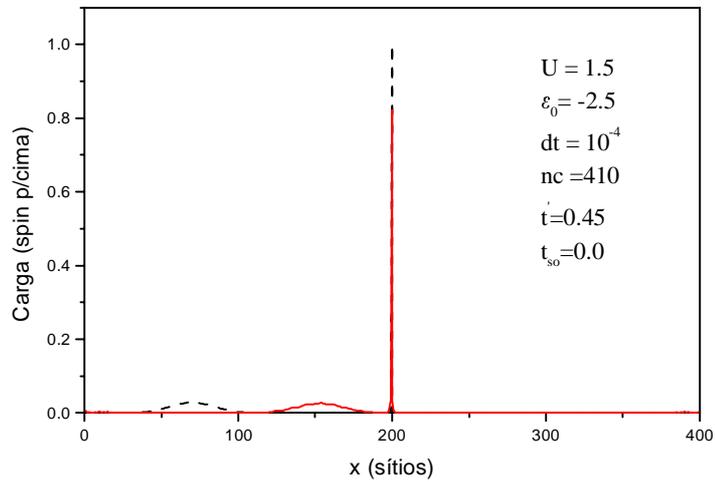


Figura 4.32: Evolução temporal da carga com spin para cima quando o PQ está carregado com uma carga com spin para cima.

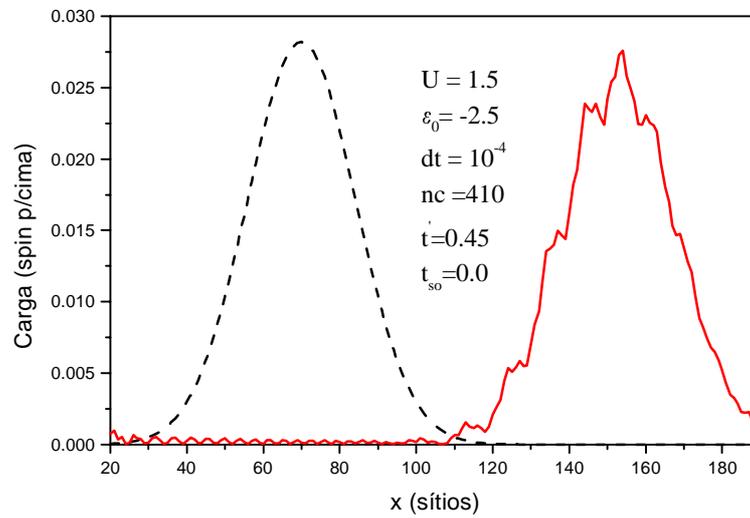


Figura 4.33: Ampliação feita entre os sítios 20 e 190 do pacote de onda refletido pelo PQ.

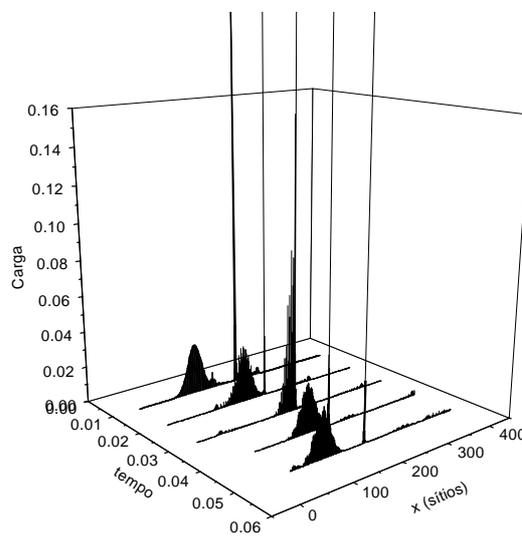


Figura 4.34: Modelo tridimensional da evolução da carga com spin para cima sendo refletida pelo PQ ocupado por um elétron com spin para cima.

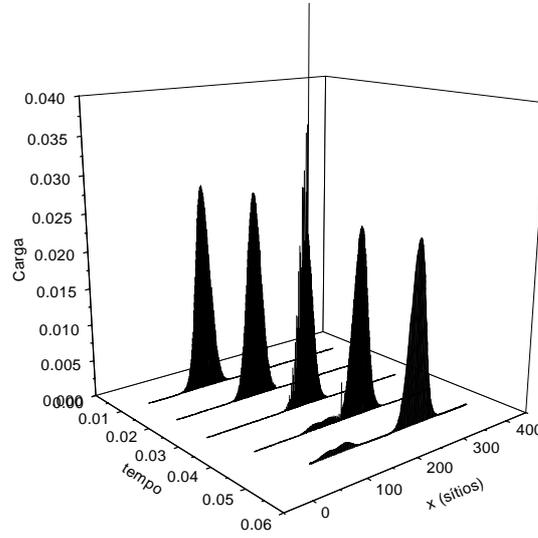


Figura 4.35: Modelo tridimensional da carga com spin para baixo tunelando o PQ ocupado por um elétron com spin para cima.

no PQ, conforme fig. (4.35), ela irá tunelar. Como comentado anteriormente, existe uma pequena reflexão causada pelo próprio PQ, mas esta não é causada pelo PEP.

Podemos definir a média temporal da corrente num intervalo τ , como:

$$I_{\sigma} = \frac{1}{\tau} \int_0^{\tau} I_{j\sigma} dt. \quad (4.46)$$

sendo τ o tempo total que a carga levou para percorrer o sistema. É importante salientar que o pacote de onda deve ter não somente a energia permitida para o tunelamento, mas também ter velocidade de grupo suficiente para alcançar num intervalo de tempo τ esse sítio j , caso contrário ele não irá contribuir para a corrente. Passando para a forma discretizada, temos da eq. (4.35):

$$I = \frac{2et}{\hbar} \frac{1}{nc} \sum_{n=0}^{nc} \text{Im} (a_j(n\delta t) a_{j+1}^*(n\delta t)). \quad (4.47)$$

Apresentamos o resultado da corrente em função do potencial de porta. Enviamos um pacote de onda com spin para cima e spin para baixo em tempos distintos e com

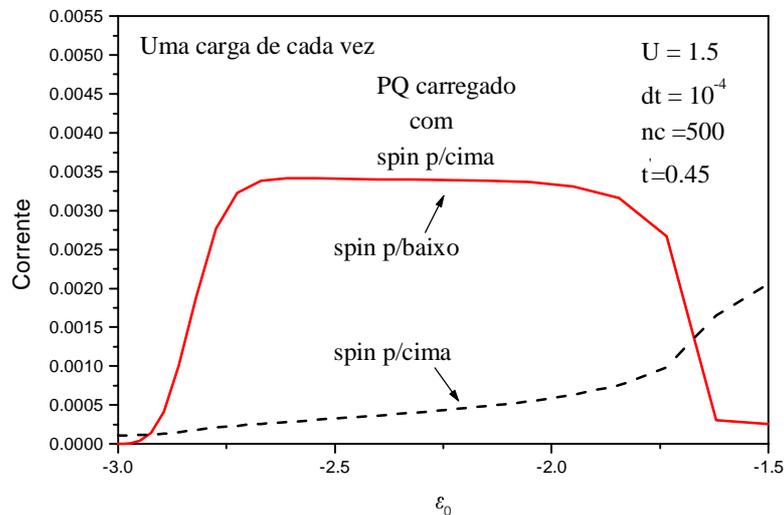


Figura 4.36: Variação da corrente em relação à energia do estado localizado com o PQ carregado com spin para cima e os dois pacotes de onda, p/cima e p/baixo sendo enviados separadamente.

energia $\varepsilon_0 + U$. Conforme era esperado, pelos motivos citados acima, a corrente tem uma polarização privilegiando cargas com spin para baixo (fig. (4.36)).

Uma vez obtida a corrente, podemos fazer um estudo da polarização de nosso pacote após o tunelamento em função da interação spin-órbita. Para isso definimos a polarização como:

$$P = \frac{\sum_{n_0}^{400} (|\Psi_{\uparrow}|^2 - |\Psi_{\downarrow}|^2)}{\sum_{n_0}^{400} (|\Psi_{\uparrow}|^2 + |\Psi_{\downarrow}|^2)}, \quad (4.48)$$

sendo n_0 o sítio onde o ponto quântico está localizado e 400 o número de sítios total da cadeia.

A polarização do pacote de onda transmitido através de um ponto quântico carregado com spin para cima é sempre negativa, ou seja, cargas com spin para baixo são mais transmitidas que cargas com spin para cima. Além disso esta polarização pode ser melhorada com o uso da interação spin-órbita, como podemos ver na fig. (4.37). Claro que esta variação de t_{so} é muito simples do ponto de vista teórico, visto que este é

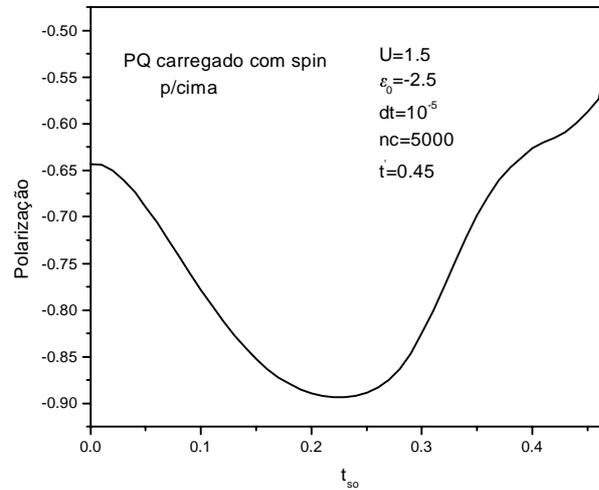


Figura 4.37: Polarização versus interação spin-órbita

apenas um dos parâmetros por nós usado, mas não podemos esquecer que, conforme apresentado na introdução do efeito Rashba, este possui propriedades relativísticas e está ligado ao campo elétrico aplicado ao sistema, tornando o problema real, ou seja experimental, extremamente complexo. Através da análise da polarização em função de t_{so} , observamos que esta possui um mínimo $t_{so} = 0.225$.

Com isso, conseguimos exatamente o que queríamos obter, um sistema de leitura de informações formado por apenas um PQ. É possível descobrir qual informação está armazenada no PQ com a análise da polarização da corrente transmitida. Se a corrente estiver polarizada positivamente o PQ está carregado com carga com spin para baixo, mas se a corrente estiver com polarização negativa, o PQ está carregado com cargas de spin para cima, como é o caso da situação por nós estudada.

