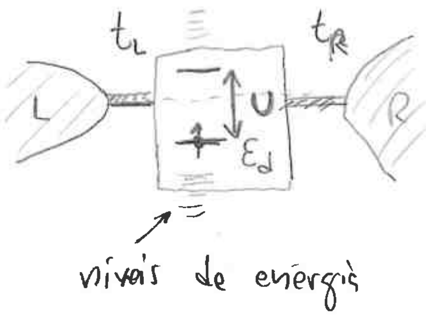
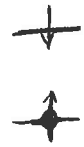
Condutância no Modelo de Anderson



Vimos que a interação Coulombiana tem forte influência nas propriedades de transporte de PQs no Regime de Bloqueio de Coulomb. Vimos também que o

Modelo de Anderson se propõe a descrever sistemas em que elétrons interagentes localizados em uma pequena região do espaço (impureza) estão acoplados a um contínuo (metal).

Argumentamos que o Modelo de Anderson pode ser usado para descrever a física de Pontos Quânticos no regime de CB acoplado a contatos metálicos. O Hamiltoniano fica:



1 nível

$\vert\uparrow\downarrow\rangle$	$2\varepsilon_d + U$
$\vert\uparrow\rangle, \vert\downarrow\rangle$	ε_d
$\vert 0\rangle$	0

$$
\begin{cases}
H_{PQ} = \sum_{\sigma} \varepsilon_d \, c_{d\sigma}^{\dagger} c_{d\sigma} + U n_{d\uparrow} n_{d\downarrow} \\[2em]
H_{coup} = H_{coup\,L} + H_{coup\,R} = \sum_{\alpha=R,L} H_{coup,\alpha} \\[1em]
\qquad = \sum_{\substack{\alpha=R,L \\ k,\sigma}} t_{k\alpha} \, c_{d\sigma}^{\dagger} c_{k\alpha\sigma} + t_{k\alpha}^{*} \, c_{k\alpha\sigma}^{\dagger} c_{d\sigma} \\[2em]
H_{band} = H_{band\,L} + H_{band\,R} = \sum_{\substack{\alpha=R,L \\ k\sigma}} \varepsilon_k \, c_{k\alpha\sigma}^{\dagger} c_{k\alpha\sigma}
\end{cases}
$$

$$\boxed{H = H_{PQ} + H_{coup} + H_{band}}$$

É possível mostrar (lista!) que o termo de acoplamento e o Hamiltoniano inteiro se reduzem ao modelo de Anderson original (com apenas um acoplamento) à combinação simétrica de operadores metálicos: $C^{\dagger}_{KS\sigma} \equiv \dfrac{(t_{KL} C^{\dagger}_{KL\sigma} + t_{KR} C^{\dagger}_{KR\sigma})}{\sqrt{|t_{KL}|^2 + |t_{KR}|^2}}$

De qualquer modo, queremos calcular a condutância através do sistema. Para isso utilizaremos a fórmula de Kubo vista anteriormente, que relaciona a condutância à correlação corrente-corrente:

$$G = \lim_{\omega \to 0} \mathrm{Re}\left[\frac{ie^2}{\omega} C^R_{I(\omega)I(\omega)}(\omega)\right] = \lim_{\omega\to 0} \frac{-e^2}{\omega}\left(\mathrm{Im}\, C^R_{II}(\omega)\right)$$

onde $C^R_{II}(\omega) = \displaystyle\int_{-\infty}^{\infty} d(t-0)\, e^{i\omega^+(t-0)} \left(-i\Theta(t-0) \langle [I(t), I(0)]_- \rangle\right)$

Precisamos então do operador corrente. Este é definido como:

corrente que "sai" de L: $\hat{I}_L = \dfrac{d}{dt}\hat{n}_L(-e) = -e\dfrac{d}{dt}\left(\sum_{K\sigma} C^{\dagger}_{KL\sigma} C_{KL\sigma}\right)$

corrente que "entra" em R: $\hat{I}_R = -(-e)\dfrac{d\hat{n}_R}{dt} = +e\dfrac{d}{dt}\left(\sum_{K\sigma} C^{\dagger}_{KR\sigma} C_{KR\sigma}\right)$

Por conservação de corrente, $I = I_L = I_R$ ou $\boxed{I = \alpha I_L + (1-\alpha) I_R}$

Pelas equações de movimento (Lista!), temos que:

$$\begin{cases} \hat{I}_L = i \displaystyle\sum_{K\sigma} t_L C^{\dagger}_{KL\sigma} C_{d\sigma} - t_L^* C^{\dagger}_{d\sigma} C_{KL\sigma} \\ \hat{I}_R = -i \displaystyle\sum_{K\sigma} t_R C^{\dagger}_{KR\sigma} C_{d\sigma} - t_R^* C^{\dagger}_{d\sigma} C_{KR\sigma} \end{cases}$$

(supondo t_L e t_R independentes de K por enquanto)

Escolhendo (adequadamente) $\alpha = \dfrac{|t_R|^2}{|t_L|^2+|t_R|^2}$, temos:

$$\hat{I} = \frac{-i}{\sqrt{|t_L|^2+|t_R|^2}} \sum_{k\sigma} \left(t_L t_R \underbrace{c^\dagger_{kA\sigma} c_{d\sigma}} - t_L^* t_R^* \underbrace{c^\dagger_{d\sigma} c_{kA\sigma}} \right) \equiv \underline{-i\left(\bar{t}\, \hat{n}_{Ad} - \bar{t}^*\, \hat{n}^\dagger_{Ad} \right)}$$

onde $c^\dagger_{kA\sigma} = \dfrac{1}{\sqrt{|t_L|^2+|t_R|^2}} \left(t_L c^\dagger_{kL\sigma} - t_R c^\dagger_{kR\sigma} \right)$ é a combinação anti-simétrica que comuta com H.

Calculemos então a correlação $\langle [I(t), I(0)]_- \rangle$: $\quad \underline{\hat{O}(t) = e^{iHt}\, \hat{O}\, e^{-iHt}}$

$$I(t) = -i\left(\bar{t}\, \hat{n}_{Ad}(t) - \bar{t}^*\, \hat{n}^\dagger_{Ad}(t) \right)$$

$\langle c_{d\sigma}^2 \rangle = \langle c_{kA\sigma}^2 \rangle = 0$

$\boxed{\hat{H} \text{ conserva o número de partículas}}$

$$\Rightarrow [I(t), I(0)] = -\Big\{ (\bar{t})^2 \overset{\text{zero } (*)}{\underbrace{\cancel{[n_{Ad}(t), n_{Ad}(0)]}}_{\propto\, c_{d\sigma}^2 c_{kA\sigma}^2}} + (\bar{t}^*)^2 \overset{\text{zero } (*)}{\underbrace{\cancel{[n^\dagger_{Ad}(t), n^\dagger_{Ad}(0)]}}_{\propto\, (c^\dagger_{d\sigma})^2 (c^\dagger_{kA\sigma})^2}}$$

$$- |\bar{t}|^2 \left([\hat{n}_{Ad}(t), \hat{n}^\dagger_{Ad}(0)] + [\hat{n}^\dagger_{Ad}(t), \hat{n}_{Ad}(0)] \right) \Big\}$$

$$= + |\bar{t}|^2 \left([c^\dagger_{kA\sigma} c_{d}(t),\, c^\dagger_{d\sigma} c_{kA\sigma}(0)] + [c^\dagger_{d\sigma} c_{kA\sigma}(t),\, c^\dagger_{kA\sigma} c_{d\sigma}(0)] \right)$$

Para calcular $\langle [I(t), I(0)]_- \rangle$, usaremos o seguinte resultado:

se $H = H_1 + H_2$ e $[H_1, H_2] = 0$ $\quad \left(e^{i(H_1+H_2)t} = e^{iH_1 t} e^{iH_2 t} \right)$

então:

$$\boxed{\left\langle \hat{c}^\dagger_{2\mu}(t)\, c_{1\nu}(t)\, c^\dagger_{1\nu'}(t')\, c_{2\mu'}(t') \right\rangle = \left\langle c^\dagger_{2\mu}(t)\, c_{2\mu'}(t') \right\rangle \left\langle c_{1\nu}(t)\, c^\dagger_{1\nu'}(t') \right\rangle}$$

Prove! (Lista 3) Na verdade vocês provaram algo parecido na lista 2

$(c^\dagger_2, c_2 \in H_2$
$\;c^\dagger_1, c_1 \in H_1)$

Isso só é possível pois $C^{\dagger}_{KA\sigma}$ e $C_{d\sigma}$ estão em termos separados do Hamiltoniano ($C_{d\sigma}$ só se acopla com $C_{KS\sigma}$).

Temos então:

$$\langle [C^{\dagger}_{KA\sigma}(t) C_{d\sigma}(t), C^{\dagger}_{d\sigma}(0) C_{KA\sigma}(0)] \rangle = \langle C^{\dagger}_{KA\sigma}(t) C_{d\sigma}(t) C^{\dagger}_{d\sigma}(0) C_{KA\sigma}(0) \rangle - \langle C^{\dagger}_{d\sigma}(0) C_{KA\sigma}(0) C^{\dagger}_{KA\sigma}(t) C_{d\sigma}(t) \rangle$$

$$\begin{pmatrix} G^{>}_{A}(t,0) = -i \langle A(t) A^{\dagger}(0) \rangle \\ G^{<}_{A}(t,0) = +i \langle A^{\dagger}(0) A(t) \rangle \end{pmatrix}$$

$$= \langle C^{\dagger}_{KA\sigma}(t) C_{KA\sigma}(0) \rangle \langle C_{d\sigma}(t) C^{\dagger}_{d\sigma}(0) \rangle - \langle C^{\dagger}_{d\sigma}(0) C_{d\sigma}(t) \rangle \langle C_{KA\sigma}(0) C^{\dagger}_{KA\sigma}(t) \rangle$$

$$= G^{<}_{KA\sigma}(0,t) G^{>}_{d\sigma}(t,0) - G^{<}_{d\sigma}(t,0) G^{>}_{KA\sigma}(0,t)$$

Do mesmo modo

$$\langle [C^{\dagger}_{d\sigma}(t) C_{KA\sigma}(t), C^{\dagger}_{KA\sigma}(0) C_{d\sigma}(0)] \rangle = \langle C^{\dagger}_{d\sigma}(t) C_{KA\sigma}(t) C^{\dagger}_{KA\sigma}(0) C_{d\sigma}(0) \rangle - \langle C^{\dagger}_{KA\sigma}(0) C_{d\sigma}(0) C^{\dagger}_{d\sigma}(t) C_{KA\sigma}(t) \rangle$$

$$= \langle C^{\dagger}_{d\sigma}(t) C_{d\sigma}(0) \rangle \langle C_{KA\sigma}(t) C^{\dagger}_{KA\sigma}(0) \rangle - \langle C^{\dagger}_{KA\sigma}(0) C_{KA\sigma}(t) \rangle \cdot \langle C_{d\sigma}(0) C^{\dagger}_{d\sigma}(t) \rangle$$

$$= G^{<}_{d\sigma}(0,t) G^{>}_{KA\sigma}(t,0) - G^{<}_{KA\sigma}(t,0) G^{>}_{d\sigma}(0,t)$$

e assim, temos:

$$\boxed{C^{R}_{II}(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} dt\, e^{i\omega^{+}t} \Big\{ -i\theta(t) |T|^{2} \Big(G^{<}_{KA\sigma}(0,t) G^{>}_{d}(t,0) - G^{<}_{KA\sigma}(t,0) G^{>}_{d}(0,t) + G^{<}_{d\sigma}(0,t) G^{>}_{KA\sigma}(t,0) - G^{<}_{d\sigma}(t,0) G^{>}_{KA\sigma}(0,t) \Big) \Big\}}$$

Usamos agora o fato de que $\boxed{\left(G^{>(<)}_{\nu}(t,0)\right)^{*} = -G^{>(<)}_{\nu}(0,t)}$

Prova: $C_{\nu}(t) = e^{iHt} C_{\nu} e^{-iHt} \Rightarrow \underline{(C_{\nu}(t))^{*} = C_{\nu}(-t)}$

$$\left(G^{>}_{\nu}(t,t')\right)^{*} = \left(-i \langle C_{\nu}(t) C^{\dagger}_{\nu}(t') \rangle\right)^{*} = +i \langle (C_{\nu}(t))^{*} (C^{\dagger}_{\nu}(t'))^{*} \rangle = +i \langle C_{\nu}(-t) C^{\dagger}_{\nu}(-t') \rangle$$

$$\left\{ \begin{array}{l} t' = t + \Delta t \Rightarrow \\ -t' = -t - \Delta t \Rightarrow \underline{-t = -t' + \Delta t} \end{array} \right. \overset{(t' = -t)}{=} +i \langle C_{\nu}(t') C^{\dagger}_{\nu}(t) \rangle = \underline{\underline{-G^{>}(t',t)}}$$

Obtemos então a seguinte expressão: $(t>0)$

$$C_{11}^R(\omega) = -i\int_{-\infty}^{\infty} dt\, e^{i\omega t} \Bigg\{ \overbrace{\frac{|t_L|^2|t_R|^2}{|t_L|^2+|t_R|^2}}^{|\bar{t}|^2} \Big(\overbrace{-G^<_{KA\partial}(-t,0)\,G^>_\partial(t,0)}^{\equiv z_1(t)} - \overbrace{\left(G^<_{KA\partial}(-t,0)\right)^*\left(G^>_\partial(t,0)\right)^*}^{z_1^*(t)}$$
$$+ \underbrace{G^<_{d\partial}(-t,0)\,G^>_{KA\partial}(t,0)}_{z_2(t)} - \underbrace{\left(G^<_{d\partial}(-t,0)\right)^*\left(G^>_{KA\partial}(t,0)\right)^*}_{z_2^*(t)} \Big)$$

onde usamos $\boxed{G^>_\nu(0,t) = G^>_\nu(-t,0) = \left(-G^>_\nu(t,0)\right)^*.}$ Temos a parte imaginária de $C^R_{II}(\omega)$ como:

$$\boxed{\mathrm{Im}\, C_{11}^R(\omega) = \frac{1}{2i}\left(C_{11}^R(\omega) - \left(C_{11}^R(\omega)\right)^*\right)}$$

onde

$$\left(C_{11}^R(\omega)\right)^* = +i\int_{-\infty}^{\infty} dt\, e^{-i\omega t}\, |\bar{t}|^2 \Big(\left(z_1^*(t) - z_1(t)\right) + \left(z_2^*(t) - z_2(t)\right) \Big) = \begin{pmatrix} t' \Rightarrow -t \\ z_1^*(t) \Rightarrow z_1(-t) \end{pmatrix}$$

$$= +i\int_{-\infty}^{\infty} dt'\, e^{+i\omega t'}\, |\bar{t}|^2 \Big(\left(z_1(t') - z_1^*(t')\right) + \left(z_2(t') - z_2^*(t')\right) \Big) = -C_{11}^R(\omega).$$

Logo

$$\boxed{\begin{aligned}\mathrm{Im}\, C_{11}^R(\omega) = -\int_{-\infty}^{\infty} dt\, e^{i\omega t}\, |\bar{t}|^2 \Big(& G^<_{KA\partial}(-t,0)\,G^>_\partial(t,0) - G^<_{KA\partial}(t,0)\,G^>_{d\partial}(-t,0) \\ & + G^<_{d\partial}(-t,0)\,G^>_{KA\partial}(t,0) - G^<_{d\partial}(t,0)\,G^>_{KA\partial}(-t,0) \Big)\end{aligned}}$$

Agora, utilizamos o seguinte resultado p/ a Transformada de Fourier:

- $\displaystyle\int dt\, e^{i\omega t} f(t)\, g(-t) = \int \frac{d\omega'}{2\pi} f(\omega+\omega')\, g(\omega')$
- $\displaystyle\int dt\, e^{i\omega t} f(-t)\, g(t) = \int \frac{d\omega'}{2\pi} f(\omega'-\omega)\, g(\omega')$

Com isso, temos:

$$\mathrm{Im}\, C_{11}^{R}(\omega) = -\int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{2\pi} |\bar{t}|^2 \Big[G_{d\partial}^{>}(\omega') \left(G_{KA\partial}^{<}(\omega'-\omega) - G_{KA\partial}^{<}(\omega'+\omega) \right) + G_{d\partial}^{<}(\omega') \left(G_{KA\partial}^{>}(\omega+\omega') - G_{KA\partial}^{>}(\omega'-\omega) \right) \Big]$$

E finalmente, usamos o Teorema de Flutuação-dissipação:

$$\begin{cases} G_{\nu}^{>}(\omega) = -i2\pi\left(1-n_F(\omega)\right) A_\nu(\omega) \\ G_{\nu}^{<}(\omega) = +i2\pi\, n_F(\omega) A_\nu(\omega) \end{cases} \Rightarrow$$

vejamos como fica o termo que envolve as $G^{>}$ e $G^{<}$:

$$[\ \ ] = -2\pi i\left(1-n_F(\omega')\right) A_d(\omega') \left(2\pi i\, n_F(\omega'-\omega) A_{KA\partial}(\omega'-\omega) - 2\pi i\, n_F(\omega'+\omega) A_{KA\partial}(\omega'+\omega) \right)$$

$$+2\pi i\, n_F(\omega') A_d(\omega') \left(-2\pi i\left(1-n_F(\omega'+\omega)\right) A_{KA\partial}(\omega'+\omega) + 2\pi i\left(1-n_F(\omega'-\omega)\right) A_{KA\partial}(\omega'-\omega) \right)$$

$$\overset{(2\pi)^2 \times}{=} \left(1-n_F(\omega')\right) A_d(\omega') \overbrace{\left(+n_F(\omega'-\omega) A_{KA\partial}(\omega'-\omega) - n_F(\omega'+\omega) A_{KA\partial}(\omega'+\omega) \right)}^{1}$$

$$- n_F(\omega') A_d(\omega') \underbrace{\left(\left(1-n_F(\omega'-\omega)\right) A_{KA\partial}(\omega'-\omega) - \left(1-n_F(\omega'+\omega)\right) A_{KA\partial}(\omega'+\omega) \right)}_{2}$$

$$\overset{(2\pi)^2}{=} A_d(\omega') \times 1 - n_F(\omega') A_d(\omega') \left(1 + 2 \right) =$$

$$\overset{(2\pi)^2 \times}{=} A_d(\omega') \left(1 - n_F(\omega') \left(A_{KA\partial}(\omega'-\omega) - A_{KA\partial}(\omega'+\omega) \right) \right)$$

$$\overset{(2\pi)^2 \times}{=} A_d(\omega') \left(A_{KA\partial}(\omega'-\omega) \left(n_F(\omega'-\omega) - n_F(\omega') \right) - A_{KA\partial}(\omega'+\omega) \left(n_F(\omega'+\omega) - n_F(\omega') \right) \right)$$

$$\Rightarrow \boxed{\mathrm{Im}\, C_{11}^{R}(\omega) = (2\pi)|\bar{t}|^2 \int_{-\infty}^{\infty} d\omega'\, A_d(\omega') \Big[A_{KA\partial}(\omega'+\omega)\left(n_F(\omega'+\omega) - n_F(\omega') \right) - A_{KA\partial}(\omega'-\omega)\left(n_F(\omega'-\omega) - n_F(\omega') \right) \Big]}$$

(quase lá)

A condutância é obtida fazendo $\boxed{G = \lim_{\omega \to 0} \frac{-e^2}{\omega} \left(\mathrm{Im}\, C_{11}^R(\omega) \right)}$

Nesse limite, $\frac{n_F(\omega'+\omega) - n_F(\omega')}{(-\omega)} \to -\frac{dn_F(\omega')}{d\omega'}$

Por outro lado, como $H_A = \sum_{k\sigma} \varepsilon_k c^\dagger_{kA\sigma} c_{kA\sigma}$ é desacoplado do resto do Hamiltoniano, $A_{kA\sigma}(\omega') = \sum_{k\sigma} \delta(\omega' - \varepsilon_k)$ (como vimos anteriormente)

Temos então:

$$G = e^2 (2\pi) |\bar{t}|^2 \sum_{k\sigma} A_{d\sigma}(\varepsilon_k) \left(-\frac{\partial n_F(\varepsilon_k)}{\partial \varepsilon_k} \right)$$

No limite contínuo, $\sum_{k\sigma} \to \int d\varepsilon\, \rho(\varepsilon)$ onde $\rho(\varepsilon)$ é a densidade de estados do metal

e definindo $\bar{\Gamma}(\varepsilon) \equiv 2\pi |\bar{t}|^2 \rho(\varepsilon)$, obtemos a expressão para a condutância: $G = \sum_\sigma G_\sigma$

$$\boxed{G_\sigma = e^2 \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon\, \bar{\Gamma}(\varepsilon)\, A_{d\sigma}(\varepsilon) \left(-\frac{\partial n_F(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} \right)}$$

que envolve a densidade espectral do ponto quantico (interagente) na presença dos acoplamentos $|t_R|, |t_L|$. $\boxed{A_{d\sigma} = -\frac{1}{\pi} \mathrm{Im}\, G_d^R(\omega)}$

Em geral, $\rho \approx \rho_0 = \mathrm{cte}$, logo

$T=0$ $\frac{\partial n_F}{\partial \varepsilon} \to \delta(\varepsilon - E_F)$

$\boxed{\bar{\Gamma} = \frac{\Gamma_L \Gamma_R}{\Gamma_L^2 + \Gamma_R^2}}$, $\boxed{\Gamma_\alpha = 2\pi |t_\alpha|^2 \rho_0}$ $\boxed{G_\sigma = e^2 \frac{\Gamma_R \Gamma_L}{\Gamma_L^2 + \Gamma_R^2} A_{d\sigma}(E_F)}$