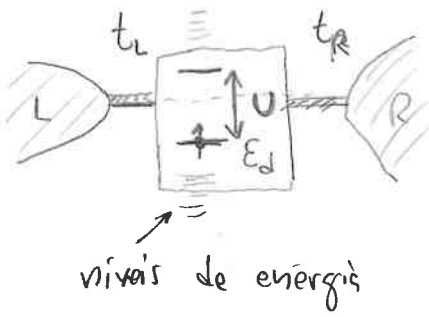


# Condutância no Modelo de Anderson



Vimos que a interação Coulombiana tem forte influência nas propriedades de transporte de elétrons 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 (impurezas) 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 contato metálico. O Hamiltoniano fica:

$$\left\{ \begin{array}{l}
 H_{pa} = \sum_{\sigma} E_d c_{d\sigma}^{\dagger} c_{d\sigma} + U N_{d\uparrow} N_{d\downarrow} \\
 H_{coup} = H_{coupL} + H_{coupR} = \sum_{\alpha=R,L} H_{coup,\alpha} \\
 = \sum_{\substack{\alpha=R,L \\ k,\sigma}} t_{k\alpha} c_{d\sigma}^{\dagger} c_{k\alpha\sigma} + t_{k\alpha}^{*} c_{k\alpha\sigma}^{\dagger} c_{d\sigma} \\
 H_{band} = H_{bandL} + H_{bandR} = \sum_{\substack{\alpha=R,L \\ k,\sigma}} E_k c_{k\alpha\sigma}^{\dagger} c_{k\alpha\sigma}
 \end{array} \right.$$

1 nível	
$\uparrow\downarrow$	$2E_d + U$
$\uparrow, \downarrow$	$E_d$
$ 0\rangle$	$0$

$H = H_{pa} + H_{coup} + H_{band}$

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:

$$C_{K\sigma}^{\dagger} \equiv \frac{(t_{KL} C_{KL\sigma}^{\dagger} + t_{KR} C_{KR\sigma}^{\dagger})}{\sqrt{|t_{KL}|^2 + |t_{KR}|^2}}$$

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:

$$G = \lim_{\omega \rightarrow 0} \text{Re} \left[ \frac{-ie^2}{\omega} C_{II}^R(\omega) \right] = \lim_{\omega \rightarrow 0} \frac{-e^2}{\omega} (\text{Im} C_{II}^R(\omega))$$

onde  $C_{II}^R(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} d(t-0) e^{i\omega(t-0)} (-i\theta(t-0) \langle [I(t), I(0)]_- \rangle)$

Precisamos então do "operador corrente". Este é definido como:

corrente que "sai" de L:  $\hat{I}_L = \frac{d}{dt} \hat{n}_L (-e) = -e \frac{d}{dt} (\sum_{k\sigma} C_{KL\sigma}^{\dagger} C_{KL\sigma})$   
 corrente que "entra" em R:  $\hat{I}_R = -(e) \frac{d\hat{n}_R}{dt} = +e \frac{d}{dt} (\sum_{k\sigma} C_{KR\sigma}^{\dagger} C_{KR\sigma})$

Por conservação de corrente,  $I = I_L = I_R \quad \Rightarrow \quad I = \alpha I_L + (1-\alpha) I_R$

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

$$\begin{cases} \hat{I}_L = i \sum_{k\sigma} t_L C_{KL\sigma}^{\dagger} C_{d\sigma} - t_L^* C_{d\sigma}^{\dagger} C_{KL\sigma} \\ \hat{I}_R = -i \sum_{k\sigma} t_R C_{KR\sigma}^{\dagger} C_{d\sigma} - t_R^* C_{d\sigma}^{\dagger} C_{KR\sigma} \end{cases} \quad \text{(supondo } t_L \text{ e } t_R \text{ independentes de } k \text{ por enquanto)}$$

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

$$\hat{I} = \frac{-i}{\sqrt{|t_L|^2 + |t_R|^2}} \sum_{k\sigma} (t_L t_R C_{KA\sigma}^+ C_{D\sigma} - t_L^* t_R^* C_{D\sigma}^+ C_{KA\sigma}) = -i (\bar{E} \hat{N}_{Ad} - \bar{E}^* \hat{N}_{Ad}^+)$$

onde  $C_{KA\sigma}^+ = \frac{1}{\sqrt{|t_L|^2 + |t_R|^2}} (t_L C_{KL\sigma}^+ - t_R C_{KR\sigma}^+)$  é a combinação anti-simétrica que comuta com H.

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

$$I(t) = -i (\bar{E} \hat{N}_{Ad}(t) - \bar{E}^* \hat{N}_{Ad}^+(t)) \quad \langle C_{D\sigma}^2 \rangle = \langle C_{KA\sigma}^2 \rangle = 0$$

$$\Rightarrow [I(t), I(0)] = - \left\{ \begin{aligned} & \cancel{\bar{E}^2 [N_{Ad}(t), N_{Ad}(0)]} + \cancel{(t^*)^2 [N_{Ad}^+(t), N_{Ad}^+(0)]} \\ & \alpha C_{D\sigma}^2 C_{KA\sigma}^2 \quad \alpha (C_{D\sigma}^+)^2 (C_{KA\sigma}^+)^2 \end{aligned} \right. \quad \left. \begin{array}{l} \text{zeros (*)} \quad \text{zeros (**)} \\ \uparrow \\ \text{\textit{N conserve} \\ \text{o número de} \\ \text{particular}} \end{array} \right.$$

$$- |\bar{E}|^2 \left( [N_{Ad}(t), N_{Ad}^+(0)] + [N_{Ad}^+(t), N_{Ad}(0)] \right)$$

$$= + |\bar{E}|^2 \left( [C_{KA\sigma}^+ C_{D\sigma}(t), C_{D\sigma}^+ C_{KA\sigma}(0)] + [C_{D\sigma}^+ C_{KA\sigma}(t), C_{KA\sigma}^+ C_{D\sigma}(0)] \right)$$

Para calcular  $\langle [I(t), I(0)]_- \rangle$ , usaremos o seguinte resultado:  
 se  $H = H_1 + H_2$  e  $[H_1, H_2] = 0$   $\left( e^{i(H_1+H_2)t} = e^{iH_1 t} e^{iH_2 t} \right)$

então:

$$\langle \hat{C}_{2\mu}^+(t) C_{1\nu}(t) C_{1\nu'}^+(t') C_{2\mu'}(t') \rangle = \langle C_{2\mu}^+(t) C_{2\mu'}(t') \rangle \langle C_{1\nu}(t) C_{1\nu'}(t') \rangle$$

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

$(C_2^+, C_2 \in H_2$   
 $C_1^+, C_1 \in H_1)$

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

Temos então:

$$\begin{aligned} \langle [C_{KA\sigma}^{\dagger}(t) C_{d\sigma}(t), C_{d\sigma}^{\dagger}(0) C_{KA\sigma}(0)] \rangle &= \langle C_{KA\sigma}^{\dagger}(t) C_{d\sigma}(t) C_{d\sigma}^{\dagger}(0) C_{KA\sigma}(0) \rangle \\ &\quad - \langle C_{d\sigma}^{\dagger}(0) C_{KA\sigma}(0) C_{KA\sigma}^{\dagger}(t) C_{d\sigma}(t) \rangle \\ \left( \begin{array}{l} G_A^{\gt}(t,0) = -i \langle A(t) A^{\dagger}(0) \rangle \\ G_A^{\lt}(t,0) = +i \langle A^{\dagger}(0) A(t) \rangle \end{array} \right) & \\ &= \langle C_{KA\sigma}^{\dagger}(t) C_{KA\sigma}(0) \rangle \langle C_{d\sigma}(t) C_{d\sigma}^{\dagger}(0) \rangle \\ &\quad - \langle C_{d\sigma}^{\dagger}(0) C_{d\sigma}(t) \rangle \langle C_{KA\sigma}(0) C_{KA\sigma}^{\dagger}(t) \rangle \\ &= G_{KA\sigma}^{\lt}(0, t) G_{d\sigma}^{\gt}(t, 0) - G_{d\sigma}^{\lt}(t, 0) G_{KA\sigma}^{\gt}(0, t) \end{aligned}$$

Do mesmo modo

$$\begin{aligned} \langle [C_{d\sigma}^{\dagger}(t) C_{KA\sigma}(t), C_{KA\sigma}^{\dagger}(0) C_{d\sigma}(0)] \rangle &= \langle C_{d\sigma}^{\dagger}(t) C_{KA\sigma}(t) C_{KA\sigma}^{\dagger}(0) C_{d\sigma}(0) \rangle \\ &\quad - \langle C_{KA\sigma}^{\dagger}(0) C_{d\sigma}(0) C_{d\sigma}^{\dagger}(t) C_{KA\sigma}(t) \rangle \\ &= \langle C_{d\sigma}^{\dagger}(t) C_{d\sigma}(0) \rangle \langle C_{KA\sigma}(t) C_{KA\sigma}^{\dagger}(0) \rangle - \langle C_{KA\sigma}^{\dagger}(0) C_{KA\sigma}(t) \rangle \\ &\quad \langle C_{d\sigma}(0) C_{d\sigma}^{\dagger}(t) \rangle \\ &= G_{d\sigma}^{\lt}(0, t) G_{KA\sigma}^{\gt}(t, 0) - G_{KA\sigma}^{\lt}(t, 0) G_{d\sigma}^{\gt}(0, t) \end{aligned}$$

e assim, temos:

$$C_{II}^R(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega t} \left\{ -i \theta(t) |E|^2 \left( G_{KA\sigma}^{\lt}(0, t) G_{d\sigma}^{\gt}(t, 0) - G_{KA\sigma}^{\lt}(t, 0) G_{d\sigma}^{\gt}(0, t) + G_{d\sigma}^{\lt}(0, t) G_{KA\sigma}^{\gt}(t, 0) - G_{d\sigma}^{\lt}(t, 0) G_{KA\sigma}^{\gt}(0, t) \right) \right\}$$

$$\begin{matrix} \langle \rangle & \langle \rangle \\ (G_{d\sigma}^{\gt}(t, 0))^* & = -G_{d\sigma}^{\gt}(0, t) \end{matrix}$$

Usamos agora o fato de que

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

$$(G_{\nu}^{\gt}(t, t'))^* = (-i \langle c_{\nu}(t) c_{\nu}^{\dagger}(t') \rangle)^* = +i \langle (c_{\nu}(t))^* (c_{\nu}^{\dagger}(t'))^* \rangle = +i \langle c_{\nu}(-t) c_{\nu}^{\dagger}(-t') \rangle$$

$$\left\{ \begin{array}{l} t' = t + \Delta t \Rightarrow \\ -t' = -t - \Delta t \Rightarrow -t = -t' + \Delta t \end{array} \right. = +i \langle c_{\nu}(t') c_{\nu}^{\dagger}(t) \rangle = -G_{\nu}^{\gt}(t', t)$$

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

$$C_{11}^R(\omega) = -i \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega t} \left\{ \frac{|\bar{E}|^2}{|t_1|^2 + |t_2|^2} \left( \underbrace{-G_{KA2}^<(-t,0) G_d^>(t,0)}_{z_1(t)} - \underbrace{(G_{KA2}^<(-t,0))^* (G_d^>(t,0))^*}_{z_1^*(t)} \right) \right. \\ \left. + \underbrace{G_{d2}^<(-t,0) G_{KA2}^>(t,0)}_{z_2(t)} - \underbrace{(G_{d2}^<(-t,0))^* (G_{KA2}^>(t,0))^*}_{z_2^*(t)} \right\}$$

onde usamos  $G_v^>(0,t) = G_v^>(-t,0) = (-G_v^>(t,0))^*$  Tomar a parte

imaginária de  $C_{II}^R(\omega)$  como:

$$I_m C_{II}^R(\omega) = \frac{1}{2i} (C_{II}^R(\omega) - (C_{II}^R(\omega))^*) \quad \text{onde}$$

$$(C_{II}^R(\omega))^* = +i \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{-i\omega t} |\bar{E}|^2 \left( (z_1^*(t) - z_1(t)) + (z_2^*(t) - z_2(t)) \right) \quad \begin{matrix} t' \Rightarrow -t \\ z_1^*(t) \Rightarrow z_1(-t) \end{matrix} \\ = +i \int_{-\infty}^{\infty} dt' e^{+i\omega t'} |\bar{E}|^2 \left( (z_1(t') - z_1^*(t')) + (z_2(t') - z_2^*(t')) \right) = -C_{II}^R(\omega)$$

Logo

$$I_m C_{II}^R(\omega) = - \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega t} |\bar{E}|^2 \left( G_{KA2}^<(-t,0) G_d^>(t,0) - G_{KA2}^<(t,0) G_{d2}^>(-t,0) \right. \\ \left. + G_{d2}^<(-t,0) G_{KA2}^>(t,0) - G_{d2}^<(t,0) G_{KA2}^>(-t,0) \right)$$

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

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

Com isso, temos:

$$\text{Im } C_{11}^R(\omega) = - \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{2\pi i} |\bar{E}|^2 \left[ G_{d0}^>(\omega') \left( G_{KA2}^<(\omega'-\omega) - G_{KA2}^<(\omega'+\omega) \right) + G_{d0}^<(\omega') \left( G_{KA2}^>(\omega+\omega') - G_{KA2}^>(\omega'-\omega) \right) \right]$$

E finalmente, usamos o Teorema de Flutuações - dissipação:

$$\begin{cases} G_{\nu}^>(\omega) = -i2\pi(1-\eta_F(\omega))A_{\nu}(\omega) \\ G_{\nu}^<(\omega) = +i2\pi\eta_F(\omega)A_{\nu}(\omega) \end{cases} \Rightarrow \text{vejamos como fica o termo que envolve as } G^> \text{ e } G^<:$$

$$\begin{aligned} [ ] &= -2\pi i (1-\eta_F(\omega')) A_d(\omega') \left( 2\pi i \eta_F(\omega'-\omega) A_{KA2}(\omega'-\omega) - 2\pi i \eta_F(\omega'+\omega) A_{KA2}(\omega'+\omega) \right) \\ &+ 2\pi i \eta_F(\omega') A_d(\omega') \left( -2\pi i (1-\eta_F(\omega'+\omega)) A_{KA2}(\omega'+\omega) + 2\pi i (1-\eta_F(\omega'-\omega)) A_{KA2}(\omega'-\omega) \right) \\ &\stackrel{(2\pi)^2_x}{=} (1-\eta_F(\omega')) A_d(\omega') \left( +\eta_F(\omega'-\omega) A_{KA2}(\omega'-\omega) - \eta_F(\omega'+\omega) A_{KA2}(\omega'+\omega) \right) \\ &- \eta_F(\omega') A_d(\omega') \left( -(1-\eta_F(\omega'-\omega)) A_{KA2}(\omega'-\omega) - (1-\eta_F(\omega'+\omega)) A_{KA2}(\omega'+\omega) \right) \end{aligned}$$

$$\stackrel{(2\pi)^2}{=} A_d(\omega') \times \textcircled{1} - \eta_F(\omega') A_d(\omega') \left( \textcircled{1} + \textcircled{2} \right) =$$

$$\stackrel{(2\pi)^2_x}{=} A_d(\omega') \left( \textcircled{1} - \eta_F(\omega') \left( A_{KA2}(\omega'-\omega) - A_{KA2}(\omega'+\omega) \right) \right)$$

$$\stackrel{(2\pi)^2_x}{=} A_d(\omega') \left( A_{KA2}(\omega'-\omega) (\eta_F(\omega'-\omega) - \eta_F(\omega')) - A_{KA2}(\omega'+\omega) (\eta_F(\omega'+\omega) - \eta_F(\omega')) \right)$$

$$\Rightarrow \text{Im } C_{11}^R(\omega) = (2\pi) |\bar{E}|^2 \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' A_d(\omega') \left[ A_{KA2}(\omega'+\omega) (\eta_F(\omega'+\omega) - \eta_F(\omega')) - A_{KA2}(\omega'-\omega) (\eta_F(\omega'-\omega) - \eta_F(\omega')) \right]$$

(quase lá)

(7)

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

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

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

Temos então:

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

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

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

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

que envolve a densidade espectral do ponto quântico (interagente) na presença dos acoplamentos  $|t_L|, |t_R|$ .  $A_{\mathbf{k}\sigma} = -\frac{1}{\pi} \text{Im} G_{\mathbf{k}\sigma}^R(\omega)$

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

$$\bar{\Gamma} = \frac{\Gamma_L \Gamma_R}{\Gamma_L^2 + \Gamma_R^2}$$

$$\Gamma_{\alpha} = 2\pi |t_{\alpha}|^2 \rho_0$$

$$T=0 \quad \frac{\partial n_F}{\partial \epsilon} \rightarrow \delta(\epsilon - E_F)$$

$$G_{\sigma} = e^2 \frac{\Gamma_L \Gamma_R}{\Gamma_L^2 + \Gamma_R^2} A_{\mathbf{k}\sigma}(E_F)$$