

RESSALVA

Atendendo solicitação do(a) autor(a), o texto completo desta dissertação será disponibilizado somente a partir de 10/02/2017.

THAIS JOSIANI SILVA FÁCIO

**TRANSPORTE ELETRÔNICO EM ESTRUTURAS
HÍBRIDAS: UMA APROXIMAÇÃO USANDO FUNÇÕES
DE GREEN DE NÃO-EQUÍLIBRIO**

Ilha Solteira - SP
2016

THAIS JOSIANI SILVA FÁCIO

**TRANSPORTE ELETRÔNICO EM ESTRUTURAS
HÍBRIDAS: UMA APROXIMAÇÃO USANDO FUNÇÕES
DE GREEN DE NÃO-EQUÍLIBRIO**

Dissertação apresentada à Faculdade de
Engenharia - UNESP - Campus de Ilha
Solteira, para obtenção do título de Mestre
em Ciência dos Materiais.

Área de conhecimento: Física da Matéria
Condensada.

Prof. Dr. Ezequiel Costa Siqueira
Orientador

Ilha Solteira - SP

2016

FICHA CATALOGRÁFICA

Desenvolvido pelo Serviço Técnico de Biblioteca e Documentação.

F141t Fácio, Thais Josiani Silva.
Transporte eletrônico em estruturas híbridas: uma aproximação usando funções de Green de não-equilíbrio / Thais Josiani Silva Fácio. - Ilha Solteira : [s.n.], 2016
63 f.:il.

Dissertação (mestrado) - Universidade Estadual Paulista. Faculdade de Engenharia de Ilha Solteira. Área de Conhecimento: Física da Matéria Condensada, 2016

Orientador: Ezequiel Costa Siqueira
Inclui bibliografia

1. Ferromagnetismo. 2. Supercondutor. 3. Ponto Quântico. 4. Transporte Quântico.



UNIVERSIDADE ESTADUAL PAULISTA

Câmpus de Ilha Solteira

CERTIFICADO DE APROVAÇÃO

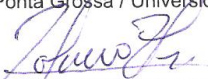
TÍTULO DA DISSERTAÇÃO: Transporte eletrônico em nanoestruturas híbridas: uma aproximação usando funções de green de não-equilíbrio.

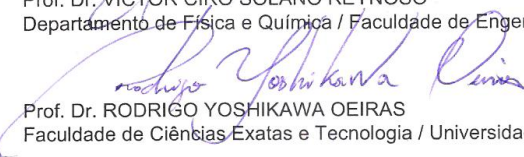
AUTORA: THAIS JOSIANI SILVA FÁCIO

ORIENTADOR: EZEQUIEL COSTA SIQUEIRA

Aprovada como parte das exigências para obtenção do Título de Mestra em CIÊNCIA DOS MATERIAIS, área: FÍSICA DA MATERIA CONDENSADA, pela Comissão Examinadora:


Prof. Dr. EZEQUIEL COSTA SIQUEIRA
Campus Ponta Grossa / Universidade Tecnológica Federal do Paraná


Prof. Dr. VÍCTOR CIRO SOLANO REYNOSO
Departamento de Física e Química / Faculdade de Engenharia de Ilha Solteira


Prof. Dr. RODRIGO YOSHIKAWA OEIRAS
Faculdade de Ciências Exatas e Tecnologia / Universidade Federal da Grande Dourados

Ilha Solteira, 10 de fevereiro de 2016

À minha família, em especial aos meus pais José e Maria, aos meus irmãos Fábio e Thamiris, ao meu marido Willian, e principalmente ao meu filho Miguel, por todo amor, apoio, confiança e incentivo em todos os momentos.

AGRADECIMENTOS

Meus agradecimentos a todos os meus familiares, amigos, professores e funcionários da FEIS-UNESP, que direta ou indiretamente contribuíram para a realização deste trabalho. Em especial, dedico meus agradecimentos:

- A Deus, por ter me dado força, coragem e saúde para chegar até aqui;
- Ao Prof. Dr. Ezequiel Costa Siqueira por toda confiança, ensinamento, incentivo, orientação e apoio;
- Ao Prof. Dr. Victor Solano Reynoso, Prof. Dr. Rodrigo Yoshikawa Oeiras, Prof. Dra. Dacy Hiroe Fujii Kanda pelas considerações nas banca examinadoras, sugestões e incentivo;
- Aos meus pais Maria e José e aos meus irmãos Fábio e Thamiris pelo carinho, apoio e incentivo;
- Ao meu marido Willian pelo amor, apoio, confiança e incentivo em todos os momentos;
- Ao meu filho Miguel que todo dia me deu forças para realizar este trabalho;
- Aos meus amigos, Maria, Marcus, Keila, Fábio, Juliano, Rodolfo, por todo apoio, incentivo e amizade;
- Aos meus sogros Maria e Valentim pelo carinho e apoio ;
- A Maria Pastora, Genésio e Leandro por toda ajuda dada a mim e a minha família;
- A Seção Técnica de Pós Graduação, no nome da Graciele Perez por toda ajuda e por todos os esclarecimentos prestados;
- Ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq) pela oportunidade e apoio financeiro.

*“Filho, desde a juventude recebe a instrução,
e encontrarás sabedoria até a tua velhice.
Aproxima-te dela como quem lava e semeia
e espera seus bons frutos.”*

Eclesiástico 6,18-19.

RESUMO

Neste trabalho é proposto a investigação teórica de uma junção formada por metal supercondutor e um metal ferromagnético acoplados através de dois canais. O primeiro canal consiste de um acoplamento direto entre os metais, enquanto que o segundo canal é formado através um ponto quântico composto por um nível discreto. Para isso utilizamos como ferramenta as funções de Green de não-equilíbrio, por meio das quais obtemos o cálculo e as curvas para a corrente elétrica, números de ocupação e transmitância. É demonstrado que podemos alterar o tipo de spin no ponto quântico, e este sobrevive a presença de um campo magnético por meio de um efeito de interferência. Por meio deste resultado, é possível manipular um spin em um ponto quântico por meio de variáveis externas, o que pode ser de interesse em aplicações na computação quântica.

Palavras-chave: Ferromagnetismo. Supercondutor. Ponto Quântico. Transporte Quântico.

ABSTRACT

In this work is proposed the theoretical investigation of a double-path junction formed by a ferromagnetic and a superconductor lead. The first path connects superconductor and ferromagnet by an insulator barrier while in the second path these metals are connected by a single level quantum dot. We have used the nonequilibrium Green's functions to perform the calculations as well as to obtain the curves for electrical current, occupation numbers and transmittance. It is shown that the spin within the quantum dot can be manipulated by means of external parameters which can be of interest in quantum computation applications.

Keywords: Ferromagnet. Superconductor. Quantum dot. Quantum transport.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1	<p>Comparação das reflexões entre elétrons quando incidem em um isolante e quando incide em um supercondutor. Na primeira figura o elétron sofre uma reflexão especular (interface normal e isolante) e na segunda o elétron é refletido após tocar a barreira com o supercondutor. Nesse caso, o elétron pode ser refletido como buraco com a mesma trajetória mas com sentido oposto.</p>	17
Figura 2	<p>Esquema diagramático das bandas do ferromagneto e do supercondutor que compõe a junção F/S, quando a polarização é nula.</p>	17
Figura 3	<p>Esquema diagramático das bandas do ferromagneto e supercondutor que compõe a junção F/S, quando está polarizado. A reflexão de Andreev não ocorre neste caso, pois não há estados de spin down para o qual o buraco que foi refletido ocupe.</p>	18
Figura 4	<p>Diagrama esquemático do sistema que estudamos neste trabalho. São dois eletrodos, um ferromagneto (F) e o outro supercondutor (S). No eletrodo ferromagneto esta aplicado um potencial (V) enquanto o eletrodo supercondutor se encontra aterrado. O ferromagneto esta conectado ao ponto quântico (PQ) por meio do acoplamento Γ_f. No PQ há um potencial aplicado, chamado de potencial de gate. O PQ se encontra conectado ao supercondutor por meio do acoplamento Γ_s. O ferromagneto encontra-se também ligado diretamente ao supercondutor por meio do acoplamento $\Lambda\Lambda$. Assim forma-se a simetria de um anel, no qual é aplicado um campo magnético, ϕ, transversal através da seção reta do anel.</p>	19
Figura 5	<p>Sistema F-PQ-S evidenciando os potenciais de bias e de gate bem como o acoplamento do PQ com eletrodos ferromagnético F (Γ_f) e supercondutor S (Γ_s).</p>	34

- Figura 6 Transmitância Andreev em Zero-bias (T_{AR}) como uma função da energia do elétron ε para diferentes valores dos acoplamentos com os leads. (a) T_{AR} são curvas para alguns valores Γ_s sendo que $\Gamma_f = 0.01$. (b) T_{AR} são algumas curvas para os valores de Γ_f sendo que $\Gamma_s = 0.12$. Parâmetros fixos: $P = 0$, $\phi = 0$, $\Lambda = 0$, $U = 0$, $eV = 0.00$, $eV_g = 0.00$ e $k_B T = 0.01$. Todos os parâmetros estão dados em unidades de gap do supercondutor. 36
- Figura 7 Transmitância Andreev em Zero-bias (T_{AR}) contornos de platôs como uma função da energia do elétron ε e do gate de voltage eV_g . (a) Caso não-interagente, $U = 0$. (b) e (c) são os picos da transmitância representada em (a). (d) Caso interagente, $U = 0.70$. (e) e (f) são os picos da transmitância obtidas em (d). Parâmetros fixos: $P = 0$, $\Gamma_f = 0.01$, $\Gamma_s = 0.12$, $\phi = 0$, $\Lambda = 0$, $eV = 0.00$, e $k_B T = 0.01$. Todos os parâmetros estão dados em unidades de gap do supercondutor. 38
- Figura 8 Transmitância Andreev em Zero-bias (T_{AR}) para alguns valores de polarização do ferromagneto. (a) $\Gamma_f = 0.20$, $\Gamma_s = 0.02$. (b) $\Gamma_f = \Gamma_s = 0.12$ sendo que a escala da transmitância encontra-se em até 0.3. Parâmetros fixados: $\phi = 0$, $\Lambda = 0$, $eV_g = 0$, $U = 0$ e $k_B T = 0.01$. Todos os parâmetros estão dados em unidades de gap do supercondutor. 40
- Figura 9 (a) Número de ocupação (n_σ) para o sistema F-PQ-S como função do gate e de voltagens de bias. Nas figuras (b) e (c) estão apresentadas as curvas de ocupações correspondentes a valores específicos de potencial bias, estes valores estão especificados em cada curva. (d) Corrente elétrica através do sistema F-PQ-S como função do gate e de bias voltagens. Nas figuras (e) e (f) algumas curvas de correntes estão apresentadas para alguns valores de bias potential. (c) Ocupação no PQ em função do gate e de bias voltages. (d) Perfis de correntes correspondentes a $V = -0.3$, $V = 0$ e $V = 0.3$. Parâmetros Fixos: $\Gamma_f = 0.001$, $\Gamma_s = 0.01$, $P = 0$, $\phi = 0$, $\Lambda = 0$, $U = 0$ e $k_B T = 0.01$. Todos os parâmetros estão dados em unidades de gap do supercondutor. 42
- Figura 10 Número de ocupação para spin up (n_\uparrow) [Fig (a)] e para spin down [Fig. (d)] como função do gate e de bias voltagens. Nas figuras (b) e (c) uma comparação entre n_\uparrow e n_\downarrow para $eV = 0.30$ e $eV = -0.30$, são mostradas respectivamente. Parâmetros fixos: $\Gamma_f = 0.001$, $\Gamma_s = 0.01$, $P = 0.50$, $\phi = 0$, $\Lambda = 0$, $U = 0$ e $k_B T = 0.01$. Todos os parâmetros estão dados em unidades de gap do supercondutor. 43

Figura 11	(a) Número de ocupação para spin up (n_{\uparrow}) [Fig (a)] como uma função do gate e de bias voltagens. Nas figuras (b) e (c) alguns perfis de ocupação n_{\uparrow} são mostrados para os valores indicados de bias voltagens. Número de ocupação para spin down (n_{\downarrow}) [Fig (d)] como uma função do gate e de bias voltagens. Nas figuras (e) e (f) alguns perfis de ocupação n_{\downarrow} são mostrados para valores indicados de bias voltagens. Parâmetros fixos: $\Gamma_f = 0.001$, $\Gamma_s = 0.01$, $P = 0.5$, $U = 0.86$, $\phi = 0$, $\Lambda = 0$ e $k_B T = 0.01$. Todos os parâmetros estão dados em unidades de gap do supercondutor.	44
Figura 12	Transmitância Andreev em Zero-bias (T_{AR}) para o caso não-interagente ($U = 0$)[Fig. (a)] e caso interagente ($U = 0.70$)[Fig. (d)] como uma função da energia (ϵ) e do acoplamento lead-lead (Λ). Nas figuras (b) e (c) são mostrados alguns perfis para os valores indicados de Λ . Parâmetros fixos: $P = 0.95$, $\Gamma_f = 0.01$, $\Gamma_s = 0.03$, $\phi = 0$, $eV = 0.00$, $eV_g = 0.00$ e $k_B T = 0.01$. Todos os parâmetros estão dados em unidades de gap do supercondutor.	47
Figura 13	Representação esquemática do experimento de Aharonov-Bohm.	48
Figura 14	Perfil Fano demonstrando a sua evolução com o parâmetro q que determina a assimetria entre os acoplamentos direto e com o nível discreto.	49
Figura 15	Detalhes das curvas da T_{AR} para $-0.2 < \epsilon < 0.2$ no qual pode-se observar a ressonância central para valores particulares de Λ . (a) $U = 0$ (b) $U = 0.70$. Parâmetros fixos: $P = 0.95$, $\Gamma_f = 0.01$, $\Gamma_s = 0.03$, $\phi = 0$, $eV = 0.00$, $eV_g = 0.00$ e $k_B T = 0.01$. Todos os parâmetros estão dados em unidades de gap do supercondutor.	49
Figura 16	Transmitância Andreev em Zero-bias, contorno de platôs como uma função da energia, ϵ , em (a) do fator de fase ϕ para $\Gamma_s = 0.03$; e em (d) acoplamento do supercondutor Γ_s com $\phi = 0$. Nas figuras (b) e (c) alguns perfis para a figura (a) classificado por A1, B1, C1 e D1 são mostrados para $\phi = 0.09\pi$, 0.50π , π e 1.7π , respectivamente. Nas figuras (e) e (f) perfis correspondentes da Figura (d) são mostrados e estão classificados por A2, B2, C2 e D2 para $\Gamma_s = 0.06$, 0.26 , 0.66 e 0.95 , respectivamente. Parâmetros fixos: $P = 0$, $\Gamma_f = 0.01$, $\Gamma = 0.5$ $U = 0$, $eV = 0.00$, $eV_g = 0.00$ e $k_B T = 0.01$. Todos os parâmetros estão dados em unidades de gap do supercondutor.	51

Figura 17	Superfície de corrente elétrica normalizada I/I_{\max} como uma função do gate de voltagem, eV_g , e de bias voltagens, eV . (a) $\Lambda = 0$. (d) $\Lambda = 0.25$. Nas figuras (b) e (c) são mostrados alguns perfis para valores específicos de bias voltagens. Esses valores estão indicados em cada curvas. Parâmetros fixos: $P = 0.85$, $\Gamma_f = 0.05$, $\Gamma_s = 0.10$, $\phi = 0$, $U = 0.85$ e $k_B T = 0.01$. Todos os parâmetros estão dados em unidades de gap do supercondutor.	53
Figura 18	Corrente elétrica normalizada I/I_{\max} como uma função do gate de voltagem eV_g para $U = 0.85$. (a) variando Λ , $\phi = 0$. (b) variando ϕ , $\Lambda = 0.5$. Parâmetros fixos: $eV = 0.45$, $P = 0.85$, $\Gamma_f = 0.05$, $\Gamma_s = 0.10$ e $k_B T = 0.01$. Todos os parâmetros estão dados em unidades de gap do supercondutor.	54
Figura 19	(a) Número de ocupação para spin up (n_{\uparrow}) [Fig (a)] como uma função do gate e da constante de acoplamento Λ . Nas figuras (b) e (c) alguns perfis de ocupação n_{\uparrow} são mostrados para valores indicados de Λ . Número de ocupação para spin down (n_{\downarrow}) [Fig (d)] como uma função do gate e da constante de acoplamento Λ . Nas figuras (e) e (f) alguns perfis de ocupação n_{\downarrow} são mostrados para valores indicados de Λ . Parâmetros fixos: $eV = 0.30$, $\Gamma_f = 0.001$, $\Gamma_s = 0.01$, $P = 0.5$, $U = 0.86$, $\phi = 0$ e $k_B T = 0.01$. Todos os parâmetros estão dados em unidades de gap do supercondutor.	56
Figura 20	Número de ocupação para spin up (n_{\uparrow}) [Fig (a)] como função do gate e da constante de fase ϕ . Nas figuras (b) e (c) alguns perfis de ocupação n_{\uparrow} são mostrados para valores indicados de ϕ . Número de ocupação para spin down (n_{\downarrow}) [Fig (d)] como função do gate e de bias voltagens. Nas figuras (e) e (f) alguns perfis de ocupação n_{\downarrow} são mostrados para valores indicados de ϕ . Parâmetros fixos: $eV = 0.30$, $\Gamma_f = 0.001$, $\Gamma_s = 0.01$, $P = 0.5$, $U = 0.86$, $\Lambda = 1.5$ e $k_B T = 0.01$. Todos os parâmetros estão dados em unidades de gap do supercondutor.	57

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	13
2	MODELO E FORMALISMO	19
2.1	Hamiltoniano	19
2.2	Funções de Green	21
2.2.1	Formas explícitas para as funções de Green $\mathbf{g}^{r/a}$	25
2.2.2	Expressões para as ocupações médias, $\langle \hat{n}_\sigma \rangle$	28
2.3	Quantidades físicas	29
3	RESULTADOS	34
3.1	Sistema F-PQ-S	34
3.1.1	Transmitância em zero-bias	35
3.1.2	Resultados para bias finita	39
3.1.2.1	Número de ocupação	39
3.2	Sistema F-PQ-S com acoplamento direto entre os eletrodos	45
3.2.1	Transmitância em zero-bias	45
3.2.2	Efeitos de interferência em bias finita	50
3.2.2.1	Corrente elétrica	52
3.2.2.2	Ocupação no PQ	54
4	CONCLUSÃO	58
	Referências Bibliográficas	60

1 INTRODUÇÃO

Transporte eletrônico em nanoescala tem recebido muita atenção da comunidade acadêmica devido tanto à novos efeitos oriundos do regime quântico — onde o regime de transporte se situa — bem como às possíveis aplicações tecnológicas de sistemas nanoestruturados. Dentro da vasta gama de possíveis sistemas, destacam-se as chamadas nanoestruturas híbridas caracterizadas pela combinação de metais tridimensionais com outros de diferentes dimensionalidades, por exemplo, um gás de elétrons bidimensional ou ainda um ponto quântico onde os elétrons estão confinados em uma única dimensão. Novamente, existem muitas possibilidades quando se considera os diversos tipos de materiais que podem ser combinados nestas nanoestruturas bem como a geometria em que estes materiais são combinados. Cada nanoestrutura apresenta propriedades específicas associadas à estas características. Neste sentido, é interessante chamar a atenção para sistemas compostos pela combinação de materiais supercondutores e ferromagnéticos. A combinação de supercondutividade e ferromagnetismo permite construir sistemas sensíveis às propriedades de spin dos elétrons que são transportados na nanoestrutura. Com efeito, supercondutividade e ferromagnetismo são fenômenos resultantes da emergência de um parâmetro de ordem abaixo de uma determinada temperatura crítica. Em supercondutores (S) ditos convencionais, o parâmetro de ordem é formado por pares de elétrons (chamados de pares de Cooper [1]) alinhados no estado singleto [2]. Em contraste, a interação de troca (*exchange*) no ferromagneto (F) induz um alinhamento paralelo de spins. Esta característica introduz condições muito restritivas para se observar a coexistência de supercondutividade e ferromagnetismo em materiais uniformes [3]. No entanto, os avanços na produção de nanoestruturas têm permitido a implementação de junções, filmes finos e nanoestruturas híbridas nas quais supercondutividade e ferromagnetismo são encontrados espacialmente separados, mas próximos o suficiente para que os chamados *efeitos de proximidade* exerçam o papel preponderante nestes sistemas. O efeito de proximidade é a influência do supercondutor sobre o ferromagnetismo e vice-versa que se observa em uma junção destes dois materiais. Esta influência altera todas as propriedades físicas dos mesmos. Uma profusão de trabalhos considerando efeitos de proximidade em nanoestruturas têm sido publicados[3, 4, 5, 6, 7]. Dentro desta vasta literatura, destacam-se o parâmetro de ordem de fase- π em sistemas Josephson do tipo S/F/S [8], o comportamento não-monotônico da temperatura crítica supercondutora com a espessura das camadas de sistemas lameliformes[9] (filmes bicamadas e multicamadas) e ainda as oscilações

da densidade eletrônica de estados[10].

Quando se considera a introdução de um ponto quântico (PQ) no sistema nanoestruturado torna-se possível analisar o transporte eletrônico por meio de níveis discretos. O PQ é uma nanoestrutura que permite emular o espectro de átomos de modo controlado[11, 12]. Deste modo, é possível investigar experimentalmente efeitos de proximidade S/F dentro do contexto de eletrônica molecular, o que é de interesse para futuras aplicações e dispositivos. A resposta de uma nanoestrutura com PQ a um potencial elétrico externo é uma corrente dependente do espectro discreto do PQ. Além disso, na escala nanométrica a dinâmica dos elétrons é puramente quântica, uma vez que os elétrons permanecem fortemente correlacionados sobre distâncias superiores ao tamanho de uma amostra. Assim, efeitos de interferência dentro da nanoestrutura são decisivos na formação do espectro de energia dos elétrons. Uma possível realização experimental deste tipo de sistema é por meio de um experimento de microscopia de varredura por tunelamento (STM) — do inglês, *Scanning Tunnelling Microscopy*, sendo um átomo de impureza é adsorvido na superfície de um material supercondutor, que faz as vezes do material hospedeiro, e a ponta do STM faz as vezes do eletrodo ferromagnético. A polarização de spin que emula o campo de troca do ferromagneto pode ser implementada conferindo-se diferentes acoplamentos para cada spin entre a ponta do microscópio e o átomo. Como resultado, a corrente que flui da ponta do microscópio para o supercondutor deve passar pelos níveis discretos do átomo. É importante notar que neste tipo de experimento é imperativo considerar a possibilidade da ponta acoplar diretamente ao material hospedeiro conferindo um canal de condução paralelo ao canal por meio do átomo. A diferença neste caso reside no caráter dos estados associado ao acoplamento direto que são caracterizados por uma banda de energia.

Embora esta seja uma situação com forte apelo experimental, não há na literatura um estudo sistemático de suas propriedades de transporte do ponto de vista teórico. De fato, existem apenas alguns trabalhos discutindo a geometria em que um material não-supercondutor e um supercondutor estão acoplados por um PQ e uma ligação direta. No entanto, mesmo com a geometria correta não há trabalhos envolvendo o acoplamento com um eletrodo ferromagnético. Deste modo, nesta dissertação será discutida tal possibilidade observando-se as propriedades como corrente elétrica, transmitância e a ocupação eletrônica no PQ. A nanoestrutura a ser estudada apresenta uma geometria de anel conforme ilustrada na figura 4. O PQ é considerado como sendo composto por um único nível discreto degenerada em spin e o acoplamento direto é modelado através de uma barreira de energia de altura W . Aplicando uma diferença de potencial sobre o ferromagneto, uma corrente elétrica é estabelecida sendo constituída por estes dois canais de condução. Com isso, a condução elétrica é realizada através através da barreira W , enquanto que no outro canal os elétrons são transferidos por um único nível discreto. Desta

observação, é esperada a ocorrência de um fenômeno de interferência conhecido na literatura como interferência Fano [13, 14, 15].

Este tipo de interferência foi primeiro observada no espectro de excitação do hidrogênio por Beutler em 1935 [16]. Algumas linhas de emissão exibiam uma absorção abrupta não prevista pelos modelos atômicos da época [17]. A explicação foi dada no mesmo ano por U. Fano baseada na interferência dos níveis discretos dos átomos com o espectro contínuo de estados tendo a mesma energia que os níveis discretos do átomo [18]. Em teoria de transporte em nanoestruturas, o efeito Fano emerge como uma curva de ressonância na condutância diferencial do sistema [19].

Para se observar efeitos sensíveis à polarização do ferromagneto, o potencial aplicado ao ferromagneto, chamado potencial de bias, será restrito a valores menores do que o gap de energia do supercondutor. Neste caso, os elétrons que são injetados no supercondutor não se propagam livremente no material mas são recombinados com outros elétrons formando pares de Cooper. Este processo é resultado do efeito de proximidade supercondutor induzido no PQ, i.e., as correlações supercondutoras que dão origem aos pares de Cooper também aparecem no PQ. O mecanismo microscópico por meio do qual os elétrons são injetados no supercondutor é chamado reflexão de Andreev [20], primeiramente proposto por A. F. Andreev em 1964 para explicar as altas condutividades térmicas de supercondutores tipo-I. Para ilustrar como ocorre este processo, na figura 1 uma interface entre um metal normal e um isolante e uma interface entre um metal normal e um supercondutor são comparadas. Na figura 1(a), o elétron que incide na interface sofre uma reflexão normal onde apenas a componente normal à interface é invertida e o elétron permanece no lado normal. Neste caso, o transporte de carga através da interface é nulo; na figura 1(b) o elétron sofre a chamada reflexão de Andreev que se distingue da figura 1(a) em dois aspectos: o elétron é retrorefletido e volta como um buraco e não como elétron. A variação de carga de $2e$ aparece no supercondutor na forma de um par de elétrons que é o par de Cooper. Nota-se, portanto, que uma carga igual ao dobro da carga do elétron é transferida de uma só vez na interface normal-supercondutora.

Para entender os efeitos de polarização spin sobre o processo de reflexão de Andreev, na figura 2 o processo é ilustrado do ponto de vista de energia dos elétrons. No lado esquerdo da figura 2 as bandas por spin de um metal normal não-polarizado são ilustradas. O potencial de bias eleva os níveis de energia do metal normal de eV em relação ao nível de Fermi (fixado pela linha tracejada), embora ainda esteja dentro do gap supercondutor. Isto pode ser visto comparando com a banda do supercondutor apresentada ao lado direito da figura 2. Quando o processo de reflexão de Andreev ocorre, um elétron com energia $+eV$ e outro com energia

$-eV$ em relação ao nível de Fermi irão aparecer como um par de Cooper no supercondutor. Os pares de Cooper são situados no nível de Fermi, todos com a mesma energia visto que fazem parte de um estado condensado. É importante notar que os elétrons do metal normal devem ter spins contrários visto que os pares de Cooper do supercondutor estão alinhados no estado singleto. Deste modo, para que o processo ocorra é imperativo que existam elétrons de ambos os spins disponíveis no nível de Fermi. Na figura 3 é apresentado o caso limite em que o metal normal agora é um ferromagneto completamente polarizado. Neste caso o processo de reflexão de Andreev não ocorre pois não há um elétron de spin down disponível para formar o par de Cooper. Dito de outra maneira, não há estados disponíveis para o buraco refletido ocupar na banda do metal normal. Isto demonstra que o transporte eletrônico é fortemente dependente da polarização do ferromagneto permitindo o controle do fluxo eletrônico por meio desta variável. Esta dependência da condutância do sistema com a polarização tem sido amplamente explorada na literatura[21, 22, 23, 24, 25] para sistemas compostos por um PQ na interface entre os dois metais. Sistemas envolvendo metais normais, sem polarização também tem sido discutidos para várias geometrias[26, 27, 28] incluindo trabalhos envolvendo a geometria de anel que será considerada nesta dissertação [29]. É importante notar, no entanto, que os efeitos de polarização combinados com a geometria de anel ainda não foram discutidos na literatura e, deste modo, é interessante investigar quais são os efeitos combinados de polarização e a interferência entre os diferentes caminhos tomados pelos elétrons na nanoestrutura.

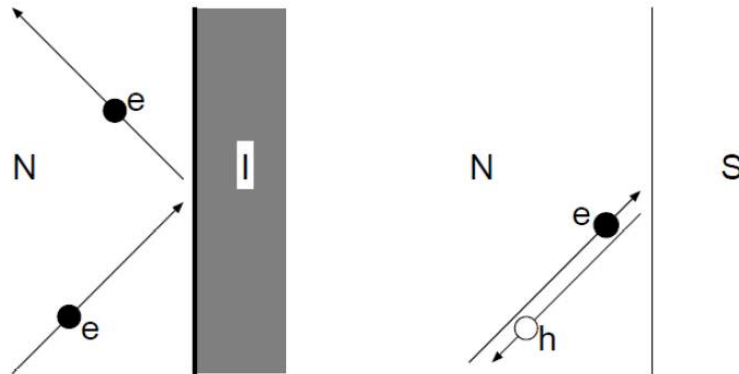
Desde que o transporte eletrônico é essencialmente um fenômeno de não-equilíbrio, o método de funções de Green de não-equilíbrio é aplicado neste trabalho. Esse formalismo foi estudado por Keldysh em 1965 [30] e de maneira independente também por Kadanoff e Baym [31] em 1962. Atualmente este é usado em sistemas de transporte eletrônicos, para obtenção de variáveis importantes como corrente elétrica, transmitância, densidade de estados, número de ocupação por meio das funções de onda.

Esta dissertação está organizada da seguinte forma:

- Capítulo 2 - apresentação do problema, o Hamiltoniano do sistema e os cálculos realizados para a obtenção da corrente elétrica, do número de ocupação e da transmitância do sistema;
- Capítulo 3 - apresentação das curvas obtidas para número de ocupação, transmitância e corrente elétrica em dois subsistemas: o primeiro sistema contém apenas o ferromagneto-ponto quântico-supercondutor (F-PQ-S) e o segundo sistema é o primeiro sistema mas com o acoplamento com o eletrodo, formando assim uma simetria de anel de Aharonov-Bohm [32];

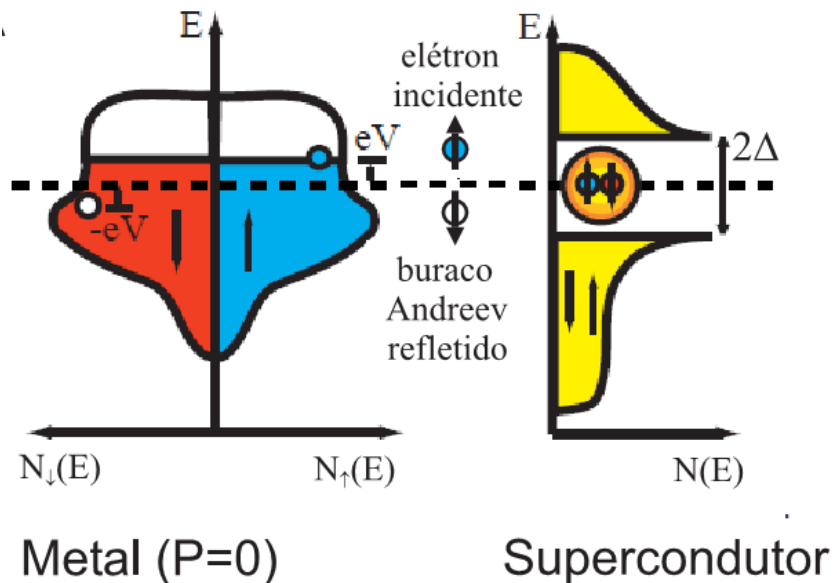
- Capítulo 4 - serão apresentadas as conclusões do trabalho.

Figura 1 : Comparação das reflexões entre elétrons quando incidem em um isolante e quando incide em um supercondutor. Na primeira figura o elétron sofre uma reflexão especular (interface normal e isolante) e na segunda o elétron é refletido após tocar a barreira com o supercondutor. Nesse caso, o elétron pode ser refletido como buraco com a mesma trajetória mas com sentido oposto.



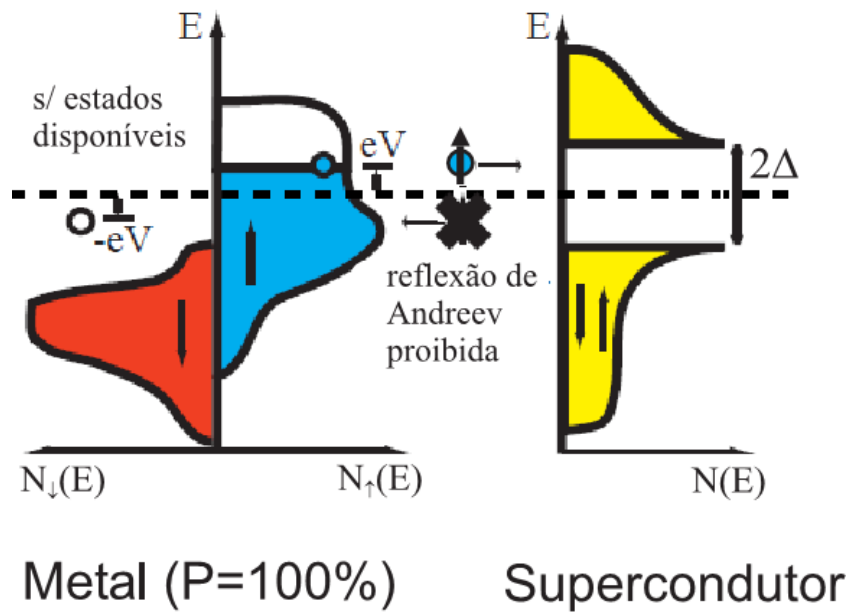
Fonte: Retirado de [33] (1997).

Figura 2 : Esquema diagramático das bandas do ferromagneto e do supercondutor que compõe a junção F/S, quando a polarização é nula.



Fonte: Retirado de [34] (1998).

Figura 3 : Esquema diagramático das bandas do ferromagneto e supercondutor que compõe a junção F/S, quando está polarizado. A reflexão de Andreev não ocorre neste caso, pois não há estados de spin down para o qual o buraco que foi refletido ocupe.



Fonte: Retirado de [34] (1998).

4 CONCLUSÃO

Neste trabalho foram estudados: o sistema F-PQ-S sem o acoplamento direto (Figura 5) e o sistema F-PQ-S com acoplamento (Figura 4), usando o formalismo de Keldysh para as funções de Green de não equilíbrio. Através desse formalismo obtivemos as equações da transmitância, da corrente elétrica e do número de ocupação.

- *Sistema F-PQ-S* (Eletrodo ferromagnético - ponto quântico - supercondutor) sem o acoplamento direto, seção 3.1;

Para a condição da transmitância em zero bias: as curvas da transmitância mostraram que devido a variação do acoplamento do supercondutor (Γ_s), há dois picos no espectro da transmitância, e ao variar o acoplamento com o ferromagneto (Γ_f), houve um alargamento de um pico, sendo que essas diferenças dos formatos das curvas ocorrem por causa da estrutura de banda de cada eletrodo.

Em relação a interação elétron-elétron, o potencial de gate eV_g induz a separação dos picos quando $U = 0$. Mas quando $U \neq 0$, ocorre um levantamento da degenerescência de spin no PQ.

Para a polarização, o que foi mostrado é que, por meio da condição de "matching", sendo esta satisfeita, todos os elétrons entram no PQ e se refletem como buraco, formando um par de Cooper no supercondutor. Mas quando essa condição não for satisfeita, então parte dos elétrons são refletidos e não são transferidos como carga para o supercondutor.

- *Sistema F-PQ-S com o acoplamento direto* entre o eletrodo ferromagnético e supercondutor considerando o fase de Aharonov-Bohm, seção 3.2.

Para o caso em que a transmitância está em zero bias: há uma mudança na forma da curva da transmitância, em relação aos resultados obtidos no sistema anterior. Essa mudança é devido ao acoplamento direto Λ , que para tal, há uma interferência entre esses dois caminhos (efeito Aharonov-Bohm). Além disso, estes exibem perfis de antiressonâncias Fano.

Os efeitos de interferência em bias finitas, ao variar o acoplamento direto, exibem uma inversão do comportamento da corrente elétrica. Quando há a inversão das ressonâncias

em antiressonâncias, a assinatura do efeito Fano demonstra que os processos de interferência entre diferentes caminhos tomados pelos elétrons, permanecem para o caso fora do equilíbrio.

Quanto ao número de ocupação, observou-se que para ambas ocupações (spin up ou spin down), a estrutura geral observada para o sistema sem acoplamento direto é mantida. O efeito de Λ não alterou a estrutura geral da superfície de ocupação, mas introduziu mudanças sobre as ressonâncias e antiressonâncias que são superpostas à estas superfícies. Variando a constante de fase (ϕ), os perfis de ressonâncias e antiressonâncias foram suprimidos, e houve a eliminação do acúmulo de spin.

Concluimos com o presente trabalho, sua grande relevância diante de tais resultados, sendo que há a possibilidade de alterar o spin no PQ, e ele sobreviver a presença de um campo magnético através de um efeito de interferência. Este sistema, portanto, é de relevância para aplicações tecnológicas.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [1] Blonder, G. E., Tinkham, M., and Klapwijk, T. M. *Phys. Rev. B* **25**(7), 4515–4532 Apr (1982).
- [2] Mahan, G. D. *Many Particle Physics, Third Edition*. Plenum, New York, (2000).
- [3] Izyumov, Y. A., Proshin, Y. N., and Khusainov, M. G. *Physics-Uspokhi* **45**(2), 109 (2002).
- [4] Žutić, I., Fabian, J., and Das Sarma, d. *Rev. Mod. Phys.* **76**(2), 323–410 Apr (2004).
- [5] Martín-Rodero, A. and Levy Yeyati, A. *Advances in Physics* **60**(6), 899–958 (2011).
- [6] Xiang, Z.-L., Ashhab, S., You, J. Q., and Nori, F. *Rev. Mod. Phys.* **85**, 623–653 Apr (2013).
- [7] Zeng, Z. Y., Li, B., and Claro, F. *Phys. Rev. B* **68**, 115319 Sep (2003).
- [8] Buzdin, A., Bulaevskii, L., and Panyukov, S. *JETP Letters* **35**(4), 178–180 (1982).
- [9] Jiang, J. d., Davidović, D., Reich, D. H., and Chien, C. L. *Phys. Rev. Lett.* **74**, 314–317 Jan (1995).
- [10] Buzdin, A. I. *Rev. Mod. Phys.* **77**(3), 935–976 Sep (2005).
- [11] van der Wiel, W. G., De Franceschi, d., Elzerman, J. M., Fujisawa, T., Tarucha, d., and Kouwenhoven, L. P. *Rev. Mod. Phys.* **75**(1), 1–22 Dec (2002).
- [12] Hanson, R., Kouwenhoven, L. P., Petta, J. R., d. Tarucha, and Vandersypen, L. M. K. *Rev. Mod. Phys.* **79**(4), 1217 (2007).
- [13] Fano, U. *Il Nuovo Cimento* **12**(3), 154–161 (1935).
- [14] Barański, J. and Domański, T. *Phys. Rev. B* **85**, 205451 May (2012).
- [15] Entin-Wohlman, O., Aharony, A., Imry, Y., and Levinson, Y. *Journal of Low Temperature Physics* **126**(3-4), 1251–1273 (2002).
- [16] Beutler, H. *Zeitschrift für Physik* **93**(3-4), 177–196 (1935).
- [17] Miroshnichenko, A. E., Flach, S., and Kivshar, Y. d. *Rev. Mod. Phys.* **82**, 2257–2298 Aug (2010).
- [18] Fano, U. *Phys. Rev.* **124**, 1866–1878 Dec (1961).
- [19] Osawa, K., Kurihara, S., and Yokoshi, N. *Phys. Rev. B* **78**, 224508 Dec (2008).
- [20] Andreev, A. F. *Sov. Phys. JETP* **19**(5), 1228–1231 (1964).

- [21] Zhu, Y., Lin, T.-h., and Sun, Q.-f. *Phys. Rev. B* **69**(12), 121302 Mar (2004).
- [22] Schmidt, S. and Alhassid, Y. *Phys. Rev. Lett.* **101**, 207003 Nov (2008).
- [23] Pan, H. and Lu, R. *Physica B: Condensed Matter* **403**(18), 3125 – 3129 (2008).
- [24] Feng, J.-F. and Xiong, S.-J. *Phys. Rev. B* **67**, 045316 Jan (2003).
- [25] Ning, W., Chen, C., Cheng, Q., and Jin, B. *Physica C: Superconductivity* **487**, 42 – 46 (2013).
- [26] Hofstetter, L., Geresdi, A., Aagesen, M., Nygård, J., Schönenberger, C., and Csonka, S. *Phys. Rev. Lett.* **104**, 246804 Jun (2010).
- [27] Zhao, HK; Wang, J. W. Q. *Physics Letters A* **378**(21), 1553–1560 (2014).
- [28] Yu, Z., Zhong-Shui, M., Qing-Feng, S., and Tsung-Han, L. *Communications in Theoretical Physics* **42**(1), 155 (2004).
- [29] Pan, H. and Lin, T.-H. *Phys. Rev. B* **74**(23), 235312 (2006).
- [30] Keldysh, L. V. **20**(4), 1018–1026 Abril (1965).
- [31] Kadanoff, L. and Baym, G. *Quantum Statistical Mechanics*. Benjammim, Inc., (1962).
- [32] Aharonov, Y. and Bohm, D. *Phys. Rev.* **115**, 485–491 Aug (1959).
- [33] Beenakker, C. W. J. *Rev. Mod. Phys.* **69**(3), 731–808 Jul (1997).
- [34] Soulen, R. J., J., Byers, J. M., Osofsky, M. d., Nadgorny, B., Ambrose, T., Cheng, d. F., Broussard, P. R., Tanaka, C. T., Nowak, J., Moodera, J. d., Barry, A., and Coey, J. M. *Science* **282**(5386), 85–88 (1998).
- [35] Fazekas, P. *Lecture notes on Electron Correlations and Magnetism*. World Scientific, Singapore, (1999).
- [36] Bardeen, J., Cooper, L. N., and Schrieffer, J. R. *Phys. Rev.* **106**(1), 162–164 Apr (1957).
- [37] Duke, C. *Tunneling in solids*. Solid state physics: Supplement. Academic Press, (1969).
- [38] Haug, H. and Jauho, A. P. *Quantum Kinetics in Transport and Optics of Semiconductors*. Springer, Berlin, (1996).
- [39] Nazarov, Y. V. and Blanter, Y. M. *Quantum Transport: Introduction to Nanoscience*. Cambridge University Press, (2009).
- [40] Di Ventra, M. *Electrical Transport in Nanoscale Systems*. Cambridge University Press, Cambridge, (2008).
- [41] Siqueira, E. C. Tese de doutorado, Universidade Estadual de Campinas, (2010).
- [42] de Jong, M. J. M. and Beenakker, C. W. J. *Phys. Rev. Lett.* **74**(9), 1657–1660 Feb (1995).
- [43] Zhu, Y., Sun, Q.-f., and Lin, T.-h. *Phys. Rev. B* **65**(2), 024516 Dec (2001).

-
- [44] Sakurai, J. J. and Napolitano, J. *Modern quantum mechanics - Revised edition*. Addison-Wesley Publishing Company, (1994).
- [45] Calle, A., Pacheco, M., and Orellana, P. *Physics Letters A* **377**(2122), 1474 – 1478 (2013).
- [46] Siqueira, E., Orellana, P., Cestari, R., Figueira, M., and Cabrera, G. *Physics Letters A* **379**(39), 2524 – 2529 (2015).