

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

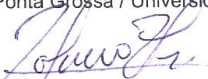
TÍTULO DA DISSERTAÇÃO: Transporte eletrônico em nanoestruturas híbridas: uma aproximação usando funções de green de não-equilíbrio.

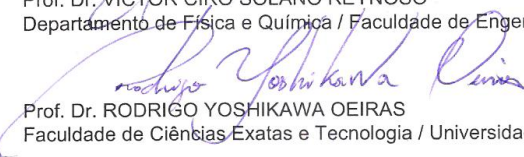
AUTORA: THAIS JOSIANI SILVA FÁCIO

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.

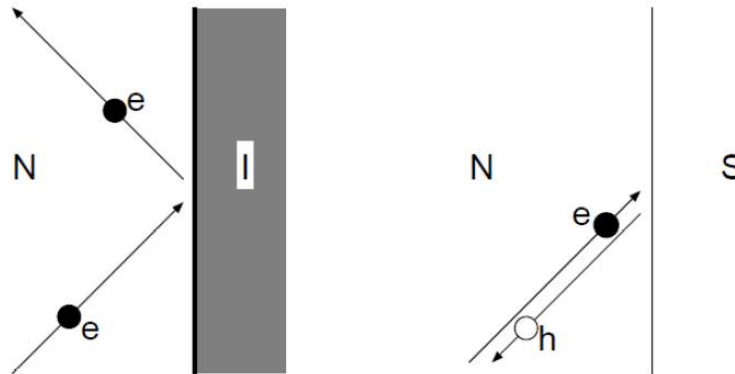
Desde que o transporte eletrônico é essencialmente um fenômeno de não-equilíbrio, o método de funções de Green de não-equilíbrio é aplicado neste trabalho. Esse formalismo foi estudado por Keldysh em 1965 [30] e de maneira independente também por Kadanoff e Baym [31] em 1962. Atualmente este é usado 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];

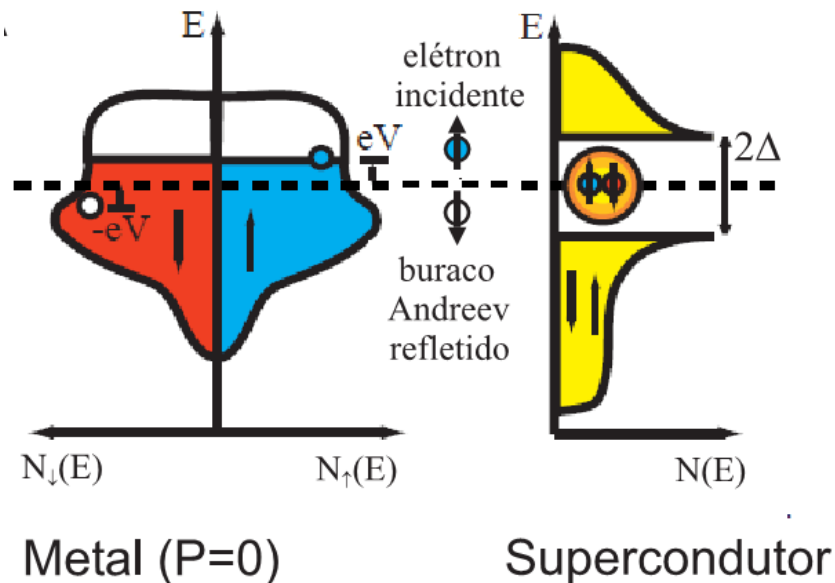
- Capítulo 4 - serão apresentadas as conclusões do trabalho.

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.



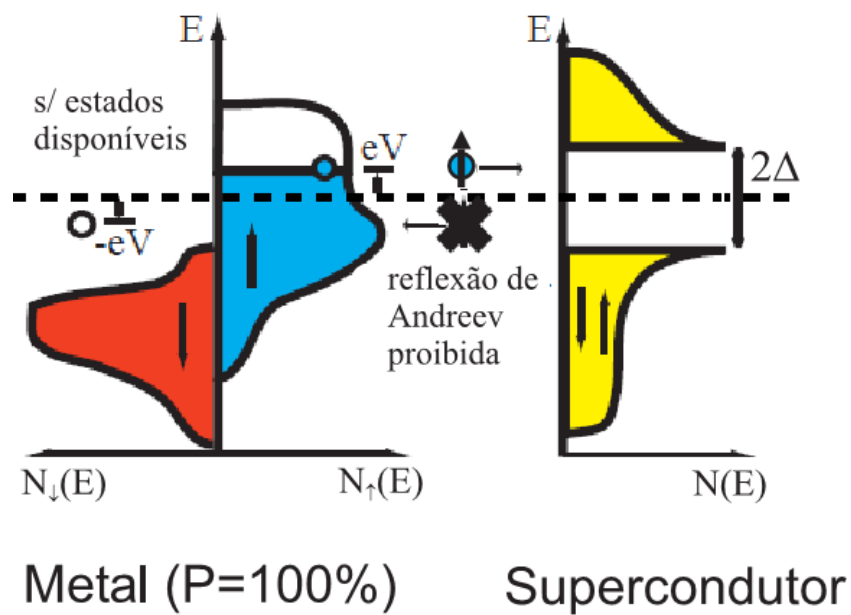
Fonte: Retirado de [33] (1997).

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).

2 MODELO E FORMALISMO

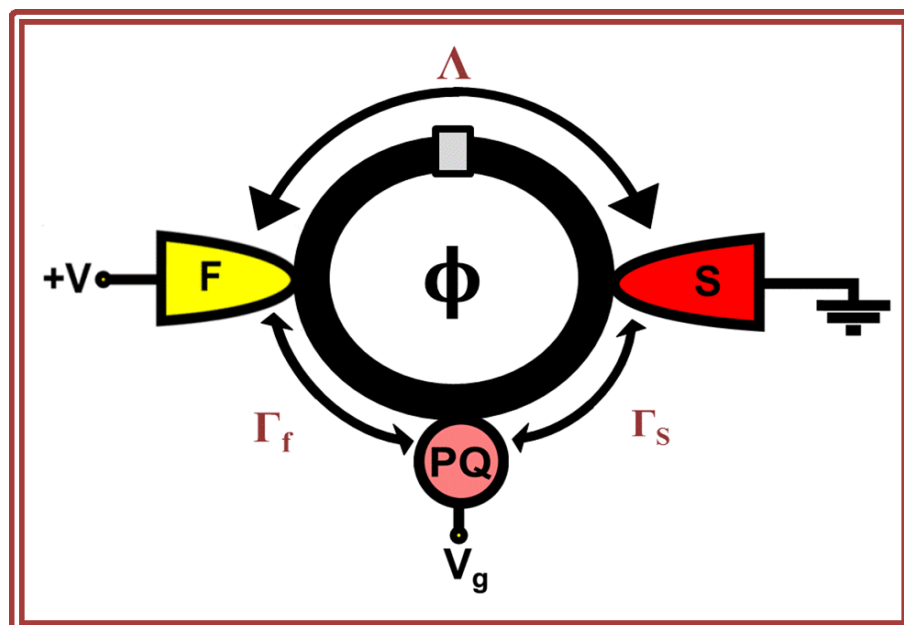
Neste capítulo apresentamos o sistema do trabalho, o Hamiltoniano deste e os cálculos efetuados para a obtenção do número de ocupação, da transmitância e corrente elétrica.

2.1 Hamiltoniano

O sistema ilustrado na figura 4, será modelado pelo seguinte Hamiltoniano:

$$\hat{H} = \hat{H}_F + \hat{H}_S + \hat{H}_{PQ} + \hat{H}_T. \quad (1)$$

Figura 4 : 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.



Fonte: Elaboração do próprio autor.

O ferromagneto, F , é um metal descrito por \hat{H}_F :

$$\hat{H}_F = \sum_{\sigma} \varepsilon_{fk\sigma} \hat{f}_{\sigma}^{\dagger} \hat{f}_{\sigma}, \quad (2)$$

com $\varepsilon_{fk\sigma} = \varepsilon - \text{sgn}(\sigma)h_e - \mu_F$. O campo efetivo h_e separa as bandas de spin do ferromagneto conferindo um caráter magnético ao sistema. O potencial químico μ_F é fixado pelo potencial elétrico V que é aplicado a F , i.e., $\mu_F = eV$. O Hamiltoniano dado pela Eq. (2) é o conhecido modelo de Stoner[35] onde magnetismo é resultante de uma separação espontânea das bandas de spin devido a um campo molecular existente no material.

O supercondutor, S , é descrito pela teoria BCS[36] e, portanto, é assumido ser um supercondutor convencional, i.e.,

$$\hat{H}_S = \sum_{\sigma} (\varepsilon - \mu_s) s_{\sigma}^{\dagger} \hat{s}_{\sigma} + \sum [\Delta_k \hat{s}_{k\uparrow}^{\dagger} \hat{s}_{-k\downarrow}^{\dagger} + \text{H.c.}], \quad (3)$$

no qual $|\Delta|$ é o gap supercondutor e o produto de operadores $\hat{s}_{k\uparrow}^{\dagger} \hat{s}_{-k\downarrow}^{\dagger}$ justifica as correlações de campo médio entre pares de elétrons arranjados no estado singleto. Além disso, o supercondutor é mantido aterrado de modo que o seu potencial químico é fixo em zero.

É importante observar que ambos F e S são descritos como um gás de elétrons livres quando no estado normal. Assim, ambos os eletrodos são descritos por uma dispersão quadrática $\varepsilon = \hbar^2 k^2 / 2m$ na ausência de magnetismo e supercondutividade, respectivamente.

O ponto quântico, PQ , é considerado como tendo um único nível, ε_d , degenerado em spin, cuja posição pode ser alterada por meio de um potencial de gate V_g . Além disso, são também consideradas correlações eletrônicas cuja intensidade é determinada pelo parâmetro U :

$$\hat{H}_{PQ} = \sum_{\sigma} (\varepsilon_d - eV_g) \hat{n}_{\sigma} + U \hat{n}_{\uparrow} \hat{n}_{\downarrow}. \quad (4)$$

A hibridização entre o nível do PQ e as bandas dos metais é modelada de modo fenomenológico através do Hamiltoniano de tunelamento[37] dado por:

$$\hat{H}_T = \sum_{\sigma} [V_{fd} \hat{f}_{\sigma}^{\dagger} \hat{d}_{\sigma} + \text{H.c.}] + \sum_{\sigma} [V_{sd} e^{i\phi} \hat{s}_{\sigma}^{\dagger} \hat{d}_{\sigma} + \text{H.c.}] + \sum_{kp\sigma} [V_{sf} \hat{f}_{k\sigma}^{\dagger} \hat{s}_{p\sigma} + \text{H.c.}], \quad (5)$$

onde o primeiro e segundo termos descrevem o acoplamento do PQ com os ferromagnetos e o supercondutor; o último descreve o acoplamento direto entre os metais. A fase ϕ no termo envolvendo o acoplamento entre PQ e S é resultante de um campo magnético aplicado perpendicular à nanoestrutura e entra com um parâmetro de fase no tunelamento dos elétrons.

Para determinar as propriedades do sistema, tais como corrente elétrica, densidade de esta-

dos dos PQs e outras quantidades físicas, será utilizado o método padrão de funções de Green [30]. Todas as quantidades físicas de interesse podem ser escritas em termos da função de Green do PQ. Esta metodologia é amplamente utilizada no tratamento de problemas de muitos corpos, ou seja, em problemas envolvendo correlações eletrônicas. No caso presente, a interação no PQ não permite determinar uma solução fechada para as quantidades físicas e sendo que aproximações são necessárias. As funções de Green permitem desenvolver aproximações de maneira sistemática e, além disso, permitem obter as mesmas quantidades físicas que seriam obtidas por meio das funções de onda.

2.2 Funções de Green

Dentro do contexto de teoria de muitos corpos, a função de Green retardada/avançada para o PQ, $\mathbf{G}_{dd}^{r/a}(t_1, t_2)$, é definida da seguinte forma:

$$\mathbf{G}_{dd}^{r/a}(t_1, t_2) = \mp \frac{i}{\hbar} \vartheta(\pm t_1 \mp t_2) \langle [\hat{\Phi}_d(t_1) \otimes \hat{\Phi}_d^\dagger(t_2) + \hat{\Phi}_d(t_2) \otimes \hat{\Phi}_d^\dagger(t_1)] \rangle \quad (6)$$

onde $\hat{\Phi}_d = (\hat{d}_\uparrow^\dagger \ \hat{d}_\downarrow \ \hat{d}_\downarrow^\dagger \ \hat{d}_\uparrow)^\dagger$ é um spinor de Nambu envolvendo operadores de criação e aniquilação para spins up e down; o símbolo \otimes indica que a função de Green é definida em termos de um produto tensorial entre os spinores $\hat{\Phi}_d^\dagger$ e $\hat{\Phi}_d$; $\vartheta(\pm t_1 \mp t_2)$ é a função de Heaviside dependente do tempo e, finalmente, o símbolo $\langle \dots \rangle$ indica uma média sobre os auto-estados do Hamiltoniano. Na teoria de equilíbrio e na teoria de Keldysh para funções de Green de não-equilíbrio, a média é realizada sobre os auto-estados do Hamiltoniano não-interagente. No caso presente, isto é realizado fazendo-se $U = 0$ na Eq. (4).

Explicitamente a expressão dada pela Eq. (6) pode ser escrita por:

$$\mathbf{G}_{dd}^{r/a}(t_1, t_2) = \mp \frac{i}{\hbar} \vartheta(\pm t_1 \mp t_2) \times \begin{pmatrix} \langle \{\hat{d}_\uparrow(t_1), \hat{d}_\uparrow^\dagger(t_2)\} \rangle & \langle \{\hat{d}_\uparrow(t_1), \hat{d}_\downarrow(t_2)\} \rangle & \langle \{\hat{d}_\uparrow(t_1), \hat{d}_\downarrow^\dagger(t_2)\} \rangle & \langle \{\hat{d}_\uparrow(t_1), \hat{d}_\uparrow(t_2)\} \rangle \\ \langle \{\hat{d}_\downarrow^\dagger(t_1), \hat{d}_\uparrow^\dagger(t_2)\} \rangle & \langle \{\hat{d}_\downarrow^\dagger(t_1), \hat{d}_\downarrow(t_2)\} \rangle & \langle \{\hat{d}_\downarrow^\dagger(t_1), \hat{d}_\downarrow^\dagger(t_2)\} \rangle & \langle \{\hat{d}_\downarrow^\dagger(t_1), \hat{d}_\uparrow(t_2)\} \rangle \\ \langle \{\hat{d}_\downarrow(t_1), \hat{d}_\uparrow^\dagger(t_2)\} \rangle & \langle \{\hat{d}_\downarrow(t_1), \hat{d}_\downarrow(t_2)\} \rangle & \langle \{\hat{d}_\downarrow(t_1), \hat{d}_\downarrow^\dagger(t_2)\} \rangle & \langle \{\hat{d}_\downarrow(t_1), \hat{d}_\uparrow(t_2)\} \rangle \\ \langle \{\hat{d}_\uparrow^\dagger(t_1), \hat{d}_\uparrow^\dagger(t_2)\} \rangle & \langle \{\hat{d}_\uparrow^\dagger(t_1), \hat{d}_\downarrow(t_2)\} \rangle & \langle \{\hat{d}_\uparrow^\dagger(t_1), \hat{d}_\downarrow^\dagger(t_2)\} \rangle & \langle \{\hat{d}_\uparrow^\dagger(t_1), \hat{d}_\uparrow(t_2)\} \rangle \end{pmatrix}, \quad (7)$$

onde as chaves indicam um anticomutador entre os operadores, i.e.,

$$\{\hat{d}_{\sigma_1}(t_1), \hat{d}_{\sigma_2}^\dagger(t_2)\} = \hat{d}_{\sigma_1}(t_1) \hat{d}_{\sigma_2}^\dagger(t_2) + \hat{d}_{\sigma_2}^\dagger(t_2) \hat{d}_{\sigma_1}(t_1).$$

A estrutura matricial da Eq. (7) é resultado da notação spinorial usada para representar os estados do PQ. Esta representação é necessária para incluir o grau de liberdade de spin, devido à quebra de simetria de spin pelo ferromagneto, e o grau de liberdade elétron-buraco

devido à quebra da simetria elétron-buraco pelo supercondutor. Como ambos subespaços são representados por matrizes 2×2 , o produto tensorial destes dois espaços resulta em uma matriz 4×4 .

Para determinar a expressão para a função de Green $\mathbf{G}_{dd}^{r/a}$ a partir de sua definição, utiliza-se a técnica da equação de movimento que consiste em utilizar a expressão para os operadores do PQ em função do tempo. A evolução temporal dos operadores do ponto quântico é determinada por meio da equação de Heisenberg e o Hamiltoniano dado pela Eq. (1). Para o operador \hat{d}_σ , por exemplo, temos que:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{d}_\sigma = [\hat{H}, \hat{d}_\sigma] \quad (8)$$

onde $[\dots]$ representam um comutador do Hamiltoniano com o operador do PQ. Para se obter a equação do movimento para o operador \hat{d}_σ é necessário substituir o Hamiltoniano dado pela Eq. (1) e fazer as operações de comutação. Neste sentido, é importante notar que todos os operadores são fermiônicos e o Hamiltoniano do PQ comuta com os demais termos da Eq. (1). Para esta última condição ser satisfeita, o anti-comutador dos operadores do PQ com os operadores dos demais elementos do sistema deve ser nulo. Com estas informações, é possível demonstrar que a evolução temporal do operador \hat{d}_σ é dada por:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{d}_\sigma(t) = (\varepsilon_d - eV_g) \hat{d}_\sigma(t) + U \hat{d}_\sigma(t) \hat{n}_{\bar{\sigma}}(t) + \sum_{\mathbf{k}} t_{fd}^* \hat{f}_{\mathbf{k}\sigma}(t) + \sum_{\mathbf{k}} t_{ds}^* \hat{s}_{\mathbf{k}\sigma}(t) \quad (9)$$

e tomando-se o adjunto da expressão acima é possível determinar a evolução temporal para o operador \hat{d}^\dagger . De posse da evolução temporal dos operadores, é possível determinar a equação para cada elemento de matriz da função de Green dada pela Eq. (7). Com efeito, para os elementos de matriz, cuja forma é dada por $G_{dd,\sigma_1\sigma_2}^{r/a}(t_1, t_2) = \mp(i/\hbar) \vartheta(\pm t_1 \mp t_2) \langle \{ \hat{d}_{\sigma_1}(t_1), \hat{d}_{\sigma_2}^\dagger(t_2) \} \rangle$, a evolução temporal resulta em:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t_1} G_{\sigma_1\sigma_2}^{r/a} = \delta(t_1 - t_2) \delta_{\sigma_1\sigma_2} + (\varepsilon_d - eV_g) G_{dd,\sigma_1\sigma_2}^{r/a}(t_1, t_2) + U G_{\sigma_1\sigma_2}^{r/a(2)}(t_1, t_2) + \sum_{\mathbf{k}} V_{fd}^* G_{fd\mathbf{k},\sigma_1\sigma_2}^{r/a}(t_1, t_2) + \sum_{\mathbf{k}} V_{ds}^* G_{sd\mathbf{k},\sigma_1\sigma_2}^{r/a}(t_1, t_2) \quad (10)$$

onde

$$G_{\sigma_1\sigma_2}^{r/a(2)} = \mp \frac{i}{\hbar} \vartheta(\pm t_1 \mp t_2) \langle \{ \hat{d}_{\sigma_1}(t_1) \hat{n}_{\bar{\sigma}_1}(t_1) \hat{d}_{\sigma_2}^\dagger(t_2) \} \rangle, \quad (11a)$$

$$G_{fd\mathbf{k},\sigma_1\sigma_2}^{r/a} = \mp \frac{i}{\hbar} \vartheta(\pm t_1 \mp t_2) \langle \{ \hat{f}_{\mathbf{k}\sigma_1}(t_1) \hat{d}_{\sigma_2}^\dagger(t_2) \} \rangle \quad (11b)$$

$$G_{sd\mathbf{k},\sigma_1\sigma_2}^{r/a} = \mp \frac{i}{\hbar} \vartheta(\pm t_1 \mp t_2) \langle \{ \hat{s}_{\mathbf{k}\sigma_1}(t_1) \hat{d}_{\sigma_2}^\dagger(t_2) \} \rangle. \quad (11c)$$

Os elementos de matriz dados pelas Eqs. (11) envolvem novas funções de Green. Em particular, o elemento de matriz dado pela Eq. (11a) é uma função de Green de segunda ordem envolvendo quatro operadores do PQ . As funções de Green dadas pelas Eqs. (11b) e (11c) envolvem operadores dos eletrodos F e S . Aplicando a equação de Heisenberg é possível construir as equações de movimento para os operadores \hat{f} e \hat{s} e, com isso, as equações para estas funções de Green. É necessário ainda a determinação das funções de Green para os demais elementos de matriz que aparecem na Eq. (7). Ao final do procedimento, é possível obter a seguinte equação matricial para a função de Green $\mathbf{G}_{dd}^{r/a}$:

$$\mathbf{G}_{dd}^{r/a}(t_1, t_2) = \mathbf{G}_{dd}^{r/a}(t_1, t_2) + \int dt_3 \mathbf{G}_{dd}^{r/a}(t_1, t_3) \bar{\mathbf{U}} \mathbf{G}_{dd}^{r/a(2)}(t_3, t_2) + \sum_{\gamma=f,s} \int dt_3 \mathbf{G}_{dd}^{r/a}(t_1, t_3) \mathbf{V}_{\gamma d}^\dagger \mathbf{G}_{\gamma d}^{r/a}(t_3, t_2). \quad (12)$$

onde as matrizes $\bar{\mathbf{U}}$ e $\mathbf{T}_{\gamma d}$ são definidas da seguinte forma:

$$\bar{\mathbf{U}} = \begin{bmatrix} U & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -U & 0 & 0 \\ 0 & 0 & U & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -U \end{bmatrix}, \quad \mathbf{V}_{\gamma d} = \begin{bmatrix} V_{\gamma d} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -V_{\gamma d}^* & 0 & 0 \\ 0 & 0 & V_{\gamma d} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -V_{\gamma d}^* \end{bmatrix}. \quad (13)$$

A função de Green de segunda ordem $\mathbf{G}_{dd}^{r/a(2)}$ deve ser aproximada para que se tenha um conjunto de equações fechada para $\mathbf{G}_{dd}^{r/a}$. Se é realizada a derivação da função de Green de segunda ordem, obtém-se uma nova equação envolvendo funções de Green de ordem superior. Deste modo, o procedimento leva à uma hierarquia infinita de funções de Green de ordem cada vez maior. O procedimento adotado neste trabalho para fechar o conjunto de equações é assumir a seguinte aproximação:

$$\mathbf{G}_{dd}^{r/a(2)}(t_3, t_2) \approx \mathbf{N} \mathbf{G}_{dd}^{r/a}(t_3, t_2), \quad (14)$$

com

$$\mathbf{N} = \begin{bmatrix} \langle \hat{n}_\downarrow \rangle & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \langle \hat{n}_\uparrow \rangle & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \langle \hat{n}_\uparrow \rangle & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \langle \hat{n}_\downarrow \rangle \end{bmatrix}, \quad (15)$$

onde $\langle \hat{n}_\sigma \rangle = \langle \hat{d}_\sigma^\dagger \hat{d}_\sigma \rangle$ é a média do operador número de elétrons de spin σ do PQ . Substituindo-se a Eq. (14) na Eq. (12), vamos obter:

$$\mathbf{G}_{dd}^{r/a}(t_1, t_2) = \mathbf{G}_{dd}^{r/a}(t_1, t_2) + \int dt_3 \mathbf{G}_{dd}^{r/a}(t_1, t_3) \Sigma_U \mathbf{G}_{dd}^{r/a}(t_3, t_2) + \sum_{\gamma=f,s} \int dt_3 \mathbf{G}_{dd}^{r/a}(t_1, t_3) \mathbf{V}_{\gamma d}^\dagger \mathbf{G}_{\gamma d}^{r/a}(t_3, t_2), \quad (16)$$

onde $\Sigma_U = \bar{\mathbf{U}}\mathbf{N}$ contém toda a informação sobre as correlações eletrônicas no interior do PQ .

Nota-se que a função de Green $\mathbf{G}_{dd}^{r/a}$ depende de novas funções de Green $\mathbf{G}_{\gamma d}^{r/a}$, $\gamma = s, f$, cujas equações são determinadas pelo mesmo procedimento que permitiu derivar a Eq. (12). Estas duas funções de Green têm a seguinte equação de movimento ($\gamma = f, s$ e $\bar{\gamma} = s, f$):

$$\mathbf{G}_{\gamma d}^{r/a}(t_1, t_2) = \int dt_3 \mathbf{g}_{\gamma\gamma}^{r/a}(t_1, t_3) \mathbf{V}_{\gamma d} \mathbf{G}_{dd}^{r/a}(t_3, t_2) + \int dt_3 \mathbf{g}_{\gamma\gamma}^{r/a}(t_1, t_3) \mathbf{T}_{\bar{\gamma}\gamma}^\dagger \mathbf{G}_{\bar{\gamma}d}^{r/a}(t_3, t_2) \quad (17)$$

com $\mathbf{g}_{\gamma\gamma}^{r/a}$ sendo a função de Green do eletrodo γ isolado do sistema. A Eq. (17) é resultado dos diversos acoplamentos entre os eletrodos F e S e o PQ . Além das funções de Green acima descritas, que envolvem operadores do PQ , é necessária a determinação das funções de Green para os eletrodos $\mathbf{G}_{ff}^{r/a}$ e $\mathbf{G}_{ss}^{r/a}$. Após a sucessiva aplicação da técnica de equações de movimento, tal como descrita acima, é possível construir uma equação geral para a função de Green do sistema completo onde emerge uma segunda estrutura matricial, desta vez, envolvendo os espaços dos eletrodos e do ponto quântico:

$$\begin{bmatrix} \mathbf{G}_{ff}^{r/a}(t_1, t_2) & \mathbf{G}_{fd}^{r/a}(t_1, t_2) & \mathbf{G}_{fs}^{r/a}(t_1, t_2) \\ \mathbf{G}_{df}^{r/a}(t_1, t_2) & \mathbf{G}_{dd}^{r/a}(t_1, t_2) & \mathbf{G}_{ds}^{r/a}(t_1, t_2) \\ \mathbf{G}_{sf}^{r/a}(t_1, t_2) & \mathbf{G}_{sd}^{r/a}(t_1, t_2) & \mathbf{G}_{ss}^{r/a}(t_1, t_2) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{g}_{ff}^{r/a}(t_1, t_2) & 0 & 0 \\ 0 & \mathbf{g}_{dd}^{r/a}(t_1, t_2) & 0 \\ 0 & 0 & \mathbf{g}_{ss}^{r/a}(t_1, t_2) \end{bmatrix} + \int dt_3 \begin{bmatrix} \mathbf{g}_{ff}^{r/a}(t_1, t_3) & 0 & 0 \\ 0 & \mathbf{g}_{dd}^{r/a}(t_1, t_3) & 0 \\ 0 & 0 & \mathbf{g}_{ss}^{r/a}(t_1, t_3) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & \mathbf{V}_{fd} & \mathbf{V}_{fs} \\ \mathbf{V}_{fd}^\dagger & \Sigma_U & \mathbf{V}_{ds}^\dagger \\ \mathbf{V}_{fs}^\dagger & \mathbf{V}_{ds} & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{G}_{ff}^{r/a}(t_3, t_2) & \mathbf{G}_{fd}^{r/a}(t_3, t_2) & \mathbf{G}_{fs}^{r/a}(t_3, t_2) \\ \mathbf{G}_{df}^{r/a}(t_3, t_2) & \mathbf{G}_{dd}^{r/a}(t_3, t_2) & \mathbf{G}_{ds}^{r/a}(t_3, t_2) \\ \mathbf{G}_{sf}^{r/a}(t_3, t_2) & \mathbf{G}_{sd}^{r/a}(t_3, t_2) & \mathbf{G}_{ss}^{r/a}(t_3, t_2) \end{bmatrix} \quad (18)$$

A Eq. (18) pode ser escrita compactamente da seguinte forma:

$$\mathbf{G}^{r/a}(t_1, t_2) = \mathbf{g}^{r/a}(t_1, t_2) + \int dt_3 \mathbf{g}^{r/a}(t_1, t_3) \Sigma \mathbf{G}^{r/a}(t_3, t_2), \quad (19)$$

onde a auto-energia contendo as informações do acoplamento e da interação intra- PQ , Σ , foi definida como:

$$\Sigma(t_3) = \begin{bmatrix} 0 & \mathbf{V}_{fd} & \mathbf{V}_{fs} \\ \mathbf{V}_{fd}^\dagger & \Sigma_U & \mathbf{V}_{ds}^\dagger \\ \mathbf{V}_{fs}^\dagger & \mathbf{V}_{ds} & 0 \end{bmatrix}. \quad (20)$$

A Eq. (19) é uma equação integral que permite a determinação da função de Green para o sistema $\mathbf{G}^{r/a}$. Neste trabalho será considerado o caso em que o potencial elétrico V , aplicado ao eletrodo F , assim como o potencial de gate V_g , aplicado ao PQ , são constantes no tempo. Neste caso, todas as quantidades físicas que serão estudadas, que são respostas do sistema aos potenciais V e V_g , são também independentes do tempo. Desta forma, estudar o chamado regime estacionário onde todas as quantidades são independentes do tempo. Por consequência, as funções de Green dependem apenas de diferenças entre os dois instantes de tempo que aparecem em seus argumentos e a Eq. (19) pode ser escrita como:

$$\mathbf{G}^{r/a}(t_1 - t_2) = \mathbf{g}^{r/a}(t_1 - t_2) + \int dt_3 \mathbf{g}^{r/a}(t_1 - t_3) \Sigma \mathbf{G}^{r/a}(t_3 - t_2). \quad (21)$$

A Eq. (21) depende apenas de um argumento e, neste caso, pode-se trabalhar com a transformada de Fourier onde trabalha-se com funções de Green dependentes da energia, ε . Esta passagem para o domínio da energia tem a vantagem de transformar a equação integral em uma equação algébrica dada por:

$$\mathbf{G}^{r/a}(\varepsilon) = \mathbf{g}^{r/a}(\varepsilon) + \mathbf{g}^{r/a}(\varepsilon) \Sigma \mathbf{G}^{r/a}(\varepsilon). \quad (22)$$

que determina todas as funções de Green retardadas/avançadas $\mathbf{G}^{r/a}$ em termos da função de Green $\mathbf{g}^{r/a}$ e dos acoplamentos e interações que estão codificadas na auto-energia Σ .

Com efeito, efetuando-se a multiplicação matricial na Eq. (22) obtém-se um sistema de nove equações acopladas para as nove funções de Green que constituem os elementos de matriz de $\mathbf{G}^{r/a}$.

2.2.1 Formas explícitas para as funções de Green $\mathbf{g}^{r/a}$

A função de Green $\mathbf{g}^{r/a}$ é definida pela matriz diagonal,

$$\mathbf{g}^{r/a} = \begin{bmatrix} \mathbf{g}_{ff}^{r/a} & 0 & 0 \\ 0 & \mathbf{g}_{dd}^{r/a} & 0 \\ 0 & 0 & \mathbf{g}_{ss}^{r/a} \end{bmatrix}. \quad (23)$$

Os elementos de matriz $\mathbf{g}_{\alpha\alpha}^{r/a}$, $\alpha = s, f, d$ são determinados pelo resolvente

$$\mathbf{g}_{\alpha\alpha}^{r/a} = [(\varepsilon \pm i\eta)\mathbf{I} - \hat{\mathbf{H}}_{\alpha}]^{-1} \quad (24)$$

onde \mathbf{I} é a matriz identidade e $\hat{\mathbf{H}}_{\alpha}$ corresponde aos Hamiltonianos dados pelas Eqs. (2), (3) e (4) escritos na notação de Nambu, i.e., expressos como uma matriz 4×4 do mesmo modo que

as funções de Green. Note que é necessário fazer $U = 0$ na substituição de \hat{H}_{PQ} na Eq.(24).

Para o ferromagneto, a Eq. (24) resulta na seguinte função de Green:

$$\mathbf{g}_{ff}^{r/a}(\varepsilon) = \mp i \frac{\Lambda_f}{V_{fs}} \mathbf{P} \quad (25)$$

onde \mathbf{P} é a chamada matriz polarização:

$$\mathbf{P} = \begin{bmatrix} 1+P & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1-P & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1-P & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1+P \end{bmatrix}. \quad (26)$$

O procedimento que resulta na Eq. (25) envolve a inversão da matriz e uma soma sobre os vetores de onda. No processo de soma foi considerada a chamada aproximação de banda larga, onde é assumido que a densidade de estados do ferromagneto é independente da energia. Esta aproximação funciona para o presente sistema porque a faixa de energia dentro da qual os potenciais variam é bastante estreita e restrita ao tamanho do gap de energia. A constante adimensional, Λ , é uma medida do acoplamento direto entre os eletrodos F e S , explicitamente, é escrita como:

$$\Lambda = \pi \rho_0 V_{fs} \quad (27)$$

onde $\rho_0 = \rho_{0\uparrow} + \rho_{0\downarrow}$ com $\rho_{0\sigma}$ sendo a densidade de estados por spin σ do ferromagneto resolvida no nível de Fermi do material.

A quantidade P é a chamada polarização de transporte sendo definida por:

$$P = \frac{\Gamma_{f\uparrow} - \Gamma_{f\downarrow}}{\Gamma_{f\uparrow} + \Gamma_{f\downarrow}} \quad (28)$$

tal que

$$\Gamma_{f\sigma} = \pi \rho_{0\sigma} |V_{fd}|^2. \quad (29)$$

Fisicamente, a quantidade $\Gamma_{f\sigma}/h$ determina a taxa de injeção/extração de elétrons de spin σ do eletrodo F .

Aplicando a Eq. (24) para o caso do eletrodo supercondutor nos permite determinar a função de Green $\mathbf{g}_{ss}^{r/a}$. Explicitamente, obtemos:

$$\mathbf{g}_{ss}^{r/a}(\varepsilon) = \mp i \frac{\Lambda}{V_{fs}} \tilde{\Delta} \quad (30)$$

onde Λ é definido na Eq. (27). Aqui está sendo suposto que a densidade de estados no nível de Fermi para F e S é a mesma quando estes se encontram no estado normal. A matriz $\tilde{\Delta}$ é definida por,

$$\tilde{\Delta} = \rho(\varepsilon) \begin{bmatrix} 1 & \frac{\Delta}{\varepsilon} & 0 & 0 \\ \frac{\Delta}{\varepsilon} & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & -\frac{\Delta}{\varepsilon} \\ 0 & 0 & -\frac{\Delta}{\varepsilon} & 1 \end{bmatrix} \quad (31)$$

onde Δ é o gap de energia supercondutor e ρ é a densidade modificada de estados cuja forma é dada por:

$$\rho(\varepsilon) = \frac{|\varepsilon| \vartheta(\varepsilon - \Delta)}{\sqrt{\varepsilon^2 - \Delta^2}} - i \frac{\varepsilon \vartheta(\Delta - |\varepsilon|)}{\sqrt{\Delta^2 - \varepsilon^2}}. \quad (32)$$

No presente trabalho, o interesse está no transporte por meio de reflexão de Andreev, i.e., para energias definidas no intervalo $-\Delta < \varepsilon < \Delta$ e, portanto, $\rho(\varepsilon)$ assume um valor complexo. O caráter complexo da densidade de estados reflete os estados ligados induzidos no PQ e, portanto, são estados representados por ondas que decrescem exponencialmente na fronteira entre o PQ e o eletrodo supercondutor. Desta forma, a medida que os elétrons entram no supercondutor, estes elétrons não se deslocam em seu interior em distâncias consideráveis recombinando rapidamente com outros elétrons e entrando no condensado de pares de Cooper.

Também é conveniente definir uma constante de acoplamento para caracterizar o transporte de elétrons entre S e o PQ . Neste caso, define-se a constante Γ_s (acoplamento de supercondutor com o PQ) da seguinte forma:

$$\Gamma_s = \pi \rho_0 |V_{sd}|^2 \quad (33)$$

a qual aparece quando é realizado o cálculo explícito dos elementos de matriz da equação de Dyson dada por Eq. (22).

Finalmente, substituindo a Eq. (4) com $U = 0$ na Eq. (24) determina-se a expressão para

\mathbf{g}_{dd}^r :

$$\mathbf{g}_{dd}^{r/a} = \begin{bmatrix} \frac{1}{\varepsilon - (\varepsilon_d - eV_g) \pm i\eta} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{\varepsilon + (\varepsilon_d - eV_g) \pm i\eta} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{\varepsilon - (\varepsilon_d - eV_g) \pm i\eta} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{\varepsilon + (\varepsilon_d - eV_g) \pm i\eta} \end{bmatrix}, \quad (34)$$

onde η é uma quantidade infinitesimal, i.e., $\eta \rightarrow 0$.

2.2.2 Expressões para as ocupações médias, $\langle \hat{n}_\sigma \rangle$

A Eq. (22) permite a determinação da função de Green para o sistema completo a partir dos parâmetros Γ_f , Γ_s , P , V_g , V e Λ . No entanto, ainda não há um sistema fechado de equações visto que a função de Green para o PQ , $\mathbf{G}_{dd}^{r/a}$, depende da ocupação média por meio da Eq. (15). Desta forma, é necessário complementar o formalismo com as equações que permitam determinar $\langle \hat{n}_\sigma \rangle$. A expressão para a ocupação média para spin up (down) é obtida por meio do elemento de matriz 11 (33) da chamada função de Green “menor” $\mathbf{G}_{dd}^<$:

$$\langle \hat{n}_{\uparrow(\downarrow)} \rangle = \frac{1}{2\pi i} \int [\mathbf{G}_{dd}^<(\varepsilon, \langle \hat{n}_\uparrow \rangle, \langle \hat{n}_\downarrow \rangle, \dots)]_{11(33)} d\varepsilon \quad (35)$$

onde a integração é realizada sobre toda a banda de energia do supercondutor. Note que a função de Green menor é, ela própria, dependente das ocupações e, por esta razão, a Eq. (35) deve ser resolvida numericamente por meio de uma rotina auto-consistente. Em outras palavras, resolvendo a integração obtém-se valores para $\langle \hat{n}_\uparrow \rangle$ e $\langle \hat{n}_\downarrow \rangle$; estes valores são então novamente substituídos na integração e novos valores são obtidos para ocupações. Este processo é repetido iteradamente até que os novos valores não sejam modificados em comparação com os anteriores, dentro de uma determinada precisão.

A obtenção da expressão para a função de Green $\mathbf{G}_{dd}^<$ é obtida por meio de técnicas avançadas de funções de Green de não-equilíbrio, também conhecido por formalismo de Keldysh [38, 30, 39]. Tecnicamente, todas as funções de Green que aparecem na teoria de transporte, i.e., funções de Green avançada, retardada e menor são obtidas a partir da função de Green $\mathbf{G}_{dd}^\tau(\tau, \tau') = -i/\hbar \langle \hat{T}_c \{ \hat{\Phi}_d(\tau) \otimes \hat{\Phi}_d^\dagger(\tau') \} \rangle$, onde τ é uma variável complexa. Aplicando um procedimento chamado de continuação analítica sobre \mathbf{G}_{dd}^τ é possível obter as funções de Green de interesse dependentes do tempo convencional. No caso das funções de Green avançada/retardada

as equações resultantes são as mesmas que as equações de Dyson que aparecem na Eq. (22); a função de Green “menor” é dada pela chamada *equação de Keldysh*[30, 38], a qual para o presente problema é dada por:

$$\mathbf{G}^< = \mathbf{G}^r \Sigma^< \mathbf{G}^a. \quad (36)$$

As funções de Green $\mathbf{G}^{r/a}$ e $\mathbf{g}^{r/a}$ foram previamente definidas enquanto que $\Sigma^<$ é dada por:

$$\Sigma^< = \begin{bmatrix} \mathbf{g}_{ff}^{r-1} \mathbf{g}_{ff}^< \mathbf{g}_{ff}^{a-1} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \mathbf{g}_{ss}^{r-1} \mathbf{g}_{ss}^< \mathbf{g}_{ss}^{a-1} \end{bmatrix}, \quad (37)$$

onde o termo central é nulo porque $\mathbf{g}_{dd}^{r-1} \mathbf{g}_{dd}^< = 0$. Usando o chamado teorema de flutuação-dissipação, é possível escrever:

$$\mathbf{g}_{ff}^< = \mathbf{F}_f (\mathbf{g}_{ff}^a - \mathbf{g}_{ff}^r) \quad (38)$$

$$\mathbf{g}_{ss}^< = \mathbf{F}_s (\mathbf{g}_{ss}^a - \mathbf{g}_{ss}^r) \quad (39)$$

onde \mathbf{F}_γ , $\gamma = f, s$ é a matriz de Fermi definida por:

$$\mathbf{F}_\gamma = \begin{bmatrix} f_\gamma & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \bar{f}_\gamma & 0 & 0 \\ 0 & 0 & f_\gamma & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \bar{f}_\gamma \end{bmatrix} \quad (40)$$

onde $f_\gamma = f(\varepsilon - eV_\gamma)$ é a função de Fermi para elétrons e $\bar{f}_\gamma = f(\varepsilon + eV_\gamma)$ é a função de Fermi para buracos para o eletrodo γ .

2.3 Quantidades físicas

As funções de Green definidas nas seções anteriores permitem determinar todas as quantidades de interesse para o sistema considerado para valores arbitrários dos parâmetros, em particular, para os valores dos potenciais aplicados. Desta forma, nesta seção será descrita a derivação da corrente elétrica e da transmitância que permitem caracterizar completamente as quantidades de transporte.

A corrente I é definida como a variação temporal do número de elétrons no eletrodo F . Neste caso, escreve-se:

$$I \equiv -e \left\langle \frac{\partial \hat{n}_f}{\partial t} \right\rangle$$

onde $\hat{n}_f = \sum_{\sigma} \hat{f}_{\sigma}^{\dagger} \hat{f}_{\sigma}$ é o operador número do eletrodo F . A variação temporal é determinada por meio da equação de Heisenberg:

$$I = -\frac{ie}{\hbar} \langle [\hat{H}, \hat{n}_f] \rangle \quad (41)$$

lembrando que $[\dots]$ representa uma operação de comutação entre o Hamiltoniano e o operador \hat{n}_f . Efetuando as operações de comutação, é possível mostrar que a corrente pode ser escrita em termos de elementos de matriz das funções de Green $\mathbf{G}_{fd}^<$ e $\mathbf{G}_{fs}^<$,

$$I = \frac{e}{\hbar} \sum_{\sigma} \left[V_{fd} \mathbf{G}_{fd, \sigma\sigma}^<(t, t) + V_{fd}^* [\mathbf{G}_{fd, \sigma\sigma}^<(t, t)]^* \right] + \frac{e}{\hbar} \sum_{\sigma} \left[V_{fs} \mathbf{G}_{fs, \sigma\sigma}^<(t, t) + V_{fs}^* [\mathbf{G}_{fs, \sigma\sigma}^<(t, t)]^* \right] \quad (42)$$

quando podemos escrever como

$$I(t) = \frac{e}{\hbar} \left[\mathbf{V}_{fd} \mathbf{G}_{fd}^<(t, t) + \text{H.c.} \right]_{11+33} + \frac{e}{\hbar} \left[\mathbf{V}_{fs} \mathbf{G}_{fs}^<(t, t) + \text{H.c.} \right]_{11+33}, \quad (43)$$

onde os índices “11+33” indica que deve-se somar os elementos de matriz 11 e 33 das matrizes dentro dos colchetes.

No regime estacionário, pode-se trabalhar com a transformada de Fourier da corrente. Neste caso, obtém-se que:

$$I = \frac{e}{\hbar} \int d\varepsilon \left[\mathbf{V}_{fd} \mathbf{G}_{fd}^<(\varepsilon) + \mathbf{V}_{fs} \mathbf{G}_{fs}^<(\varepsilon) + \text{H.c.} \right]_{11+33}. \quad (44)$$

A corrente dada pela Eq. (44) pode ser expressa em uma forma ainda mais compacta utilizando-se as matrizes de carga \mathbf{Q} :

$$\mathbf{Q}_{(e,h)f} = \begin{bmatrix} \mathbf{q}_{e,h} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \end{bmatrix}, \quad \mathbf{Q}_{(e,h)s} = \begin{bmatrix} \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{q}_{e,h} \end{bmatrix} \quad (45)$$

onde as matrizes $\mathbf{q}_{e,h}$ são dadas por,

$$\mathbf{q}_e = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{q}_h = - \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (46)$$

Após alguma álgebra pode-se escrever a corrente I na forma:

$$I = \frac{2e}{h} \text{Re} \int d\varepsilon \text{Tr}[\mathbf{Q}_{ef} \Sigma \mathbf{G}^r \mathbf{F} (\mathbf{g}^{r-1} - \mathbf{g}^{a-1}) \mathbf{G}^a] \quad (47)$$

onde a matriz \mathbf{F} é dada por:

$$\mathbf{F} = \begin{bmatrix} \mathbf{F}_f & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{F}_s \end{bmatrix}. \quad (48)$$

A aproximação utilizada para reduzir a função de Green de segunda ordem permite escrever a corrente em uma expressão idêntica à fórmula de Landauer[40]. Nesta expressão é possível identificar a transmitância do sistema que permite determinar a probabilidade de transmissão com que os elétrons são injetados no supercondutor. Para se obter tal expressão, é necessário explicitar as funções de Fermi que aparecem na matriz \mathbf{F} :

$$I = \frac{2e}{h} \text{Re} \int d\varepsilon \text{Tr}[\mathbf{Q}_{ef} \Sigma \mathbf{G}^r (f_f \mathbf{Q}_{ef} - \bar{f}_f \mathbf{Q}_{hf} + f_s \mathbf{Q}_{es} - f_s \mathbf{Q}_{hs}) (\mathbf{g}^{r-1} - \mathbf{g}^{a-1}) \mathbf{G}^a] \quad (49)$$

onde os sinais negativos das matrizes \mathbf{Q}_h foram explicitados para facilitar a álgebra. A equação acima resulta em quatro termos,

$$I = \frac{2e}{h} \text{Re} \int d\varepsilon \{ f_f \text{Tr}[\mathbf{Q}_{ef} \Sigma \mathbf{G}^r \mathbf{Q}_{ef} (\mathbf{g}^{r-1} - \mathbf{g}^{a-1}) \mathbf{G}^a] - \bar{f}_f \text{Tr}[\mathbf{Q}_{ef} \Sigma \mathbf{G}^r \mathbf{Q}_{hf} (\mathbf{g}^{r-1} - \mathbf{g}^{a-1}) \mathbf{G}^a] \\ + f_s \text{Tr}[\mathbf{Q}_{ef} \Sigma \mathbf{G}^r \mathbf{Q}_{es} (\mathbf{g}^{r-1} - \mathbf{g}^{a-1}) \mathbf{G}^a] - f_s \text{Tr}[\mathbf{Q}_{ef} \Sigma \mathbf{G}^r \mathbf{Q}_{hs} (\mathbf{g}^{r-1} - \mathbf{g}^{a-1}) \mathbf{G}^a] \} \quad (50)$$

e aqui será considerado o caso em que a energia ε está delimitada pelo gap de energia supercondutor, $|\varepsilon| < \Delta$. Os termos cujos coeficientes são as funções de Fermi do eletrodo S representam o tunelamento direto de elétrons acima do gap supercondutor e, portanto, não contribuem para a corrente no regime de subgap. Deste modo, a corrente assume a forma mais simples:

$$I = \frac{2e}{h} \text{Re} \int \{ f_f \text{Tr}[\mathbf{Q}_{ef} \Sigma \mathbf{G}^r \mathbf{Q}_{ef} (\mathbf{g}^{r-1} - \mathbf{g}^{a-1}) \mathbf{G}^a] + \bar{f}_f \text{Tr}[\mathbf{Q}_{ef} \Sigma \mathbf{G}^r \mathbf{Q}_{hf} (\mathbf{g}^{r-1} - \mathbf{g}^{a-1}) \mathbf{G}^a] \} d\varepsilon \quad (51)$$

onde o sinal negativo foi novamente absorvido na matriz \mathbf{Q}_{hf} .

A particularização para o regime subgap implica em assumir que a transmissão de elétrons como quasipartículas no supercondutor é nula, i.e., $T = T_{ee} + T_{eh} = 0$. Deste modo, a conservação da probabilidade implica que a soma das probabilidades de reflexão deve ser igual à unidade, i.e., $R_{ee} + R_{eh} = 1$. Com efeito, a Eq. (51) é composta por dois termos: o primeiro corresponde à reflexão de elétrons novamente em elétrons no ferromagneto enquanto que o

segundo termo representa a reflexão de elétrons em buracos.

No caso estacionário, o número médio de elétrons no eletrodo F é constante no tempo, dependendo apenas dos parâmetros fixos do sistema. O fluxo de elétrons que incide na interface entre o eletrodo F e o PQ é dado por:

$$I_{\rightarrow} = \frac{2e}{h} \int f_f(\varepsilon) d\varepsilon. \quad (52)$$

e usando o fato de que a soma das probabilidades de reflexão deve ser igual a 1, então pode-se escrever a Eq. (52) na forma:

$$I_{\rightarrow} = \frac{2e}{h} \int (R_{ee} + R_{eh}) f_f(\varepsilon) d\varepsilon \quad (53)$$

ou ainda

$$I_{\rightarrow} = \frac{2e}{h} \text{Re} \int f_f \{ \text{Tr}[\mathbf{Q}_{ef} \Sigma \mathbf{G}^r \mathbf{Q}_{ef} (\mathbf{g}^{r-1} - \mathbf{g}^{a-1}) \mathbf{G}^a] + \text{Tr}[\mathbf{Q}_{ef} \Sigma \mathbf{G}^r \mathbf{Q}_{hf} (\mathbf{g}^{r-1} - \mathbf{g}^{a-1}) \mathbf{G}^a] \} d\varepsilon. \quad (54)$$

O fluxo de elétrons que retorna da interface é justamente a corrente I dada pela Eq. (51). No regime estacionário a diferença entre os fluxos deve aparecer como uma corrente fixa que é injetada no supercondutor, assim, tem-se que:

$$I = I_{\rightarrow} - I_{\leftarrow} \quad (55)$$

e identificando o fluxo I_{\leftarrow} com a Eq. (51) e I_{\leftarrow} da Eq. (54), segue que:

$$\begin{aligned} I &= \frac{2e}{h} \text{Re} \int f_f \{ \text{Tr}[\mathbf{Q}_{ef} \Sigma \mathbf{G}^r \mathbf{Q}_{ef} (\mathbf{g}^{r-1} - \mathbf{g}^{a-1}) \mathbf{G}^a] + \text{Tr}[\mathbf{Q}_{ef} \Sigma \mathbf{G}^r \mathbf{Q}_{hf} (\mathbf{g}^{r-1} - \mathbf{g}^{a-1}) \mathbf{G}^a] \} d\varepsilon \\ &\quad - \frac{2e}{h} \text{Re} \int \{ f_f \text{Tr}[\mathbf{Q}_{ef} \Sigma \mathbf{G}^r \mathbf{Q}_{ef} (\mathbf{g}^{r-1} - \mathbf{g}^{a-1}) \mathbf{G}^a] + \bar{f}_f \text{Tr}[\mathbf{Q}_{ef} \Sigma \mathbf{G}^r \mathbf{Q}_{hf} (\mathbf{g}^{r-1} - \mathbf{g}^{a-1}) \mathbf{G}^a] \} d\varepsilon \end{aligned} \quad (56)$$

o que pode ser simplificado na forma:

$$I = \frac{4e}{h} \text{Re} \int \text{Tr}[\mathbf{Q}_{ef} \Sigma \mathbf{G}^r \mathbf{Q}_{hf} (\mathbf{g}^{r-1} - \mathbf{g}^{a-1}) \mathbf{G}^a] (f_f - \bar{f}_f) d\varepsilon \quad (57)$$

e identificando a transmitância por reflexão de Andreev $T_A(\varepsilon)$, pode-se escrever a corrente na forma procurada:

$$I = \frac{4e}{h} \int T_A(\varepsilon) (f_f - \bar{f}_f) d\varepsilon \quad (58)$$

onde,

$$T_A(\varepsilon) = \text{Re}\{\text{Tr}[\mathbf{Q}_{ef}\Sigma\mathbf{G}^r\mathbf{Q}_{hf}(\mathbf{g}^{r-1} - \mathbf{g}^{a-1})\mathbf{G}^a]\}. \quad (59)$$

As Eqs. (58) e (59) são os resultados centrais do presente trabalho. A corrente elétrica está escrita na forma usual de uma probabilidade de transmissão ponderada pelas funções de Fermi de elétrons e buracos. É importante notar que a corrente via reflexão de Andreev difere das equações usuais envolvendo tunelamento direto entre dois reservatórios por meio de um PQ. Usualmente a corrente é ponderada pelas funções de Fermi de ambos os reservatórios, porém, quando a corrente envolve a corrente de subgap a corrente depende apenas das ocupações no reservatório ferromagnético. Outro aspecto importante a notar na corrente elétrica é o fator $4e/h$ que aparece multiplicando a integração da Eq. (58). É usual um fator de $2e/h$ ser encontrado refletindo o quantum de condutância $2e^2/h$ onde o 2 reflete a degenerescência de spin. Aqui o segundo fator 2 reflete o fato de que uma carga igual a $2e$ é transferida ao condensado supercondutor a cada evento de reflexão de Andreev.

3 RESULTADOS

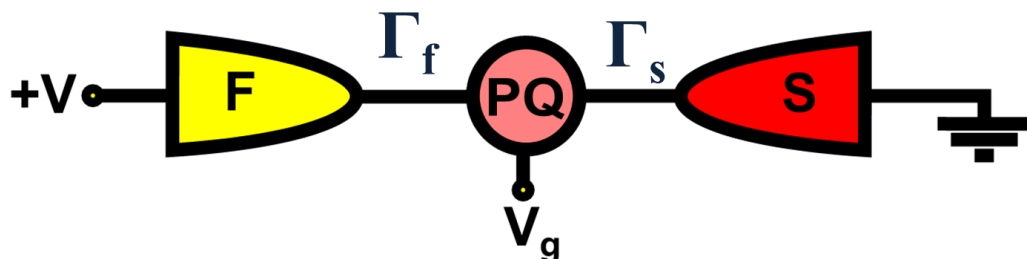
Neste capítulo serão apresentados os resultados obtidos para dois sistemas:

- *Sistema F-PQ-S* (Eletrodo ferromagnético - ponto quântico - supercondutor) sem o acoplamento direto, seção 3.1;
- *Sistema F-PQ-S com o acoplamento direto* entre o eletrodo ferromagnético e supercondutor considerando a fase de Aharonov-Bohm, seção 3.2.

3.1 Sistema F-PQ-S

Nesta seção é considerado o sistema em que o ponto quântico está acoplado a um eletrodo ferromagnético e um eletrodo supercondutor (Fig. 5). Um potencial elétrico V é aplicado ao eletrodo ferromagnético enquanto o supercondutor é mantido aterrado. Este potencial será denominado de potencial de bias, ou simplesmente bias, para manter a nomenclatura amplamente utilizada na literatura[40]. Deste modo, uma corrente elétrica é injetada no supercondutor através dos estados discretos do ponto quântico (PQ). Além disso, também é considerado um potencial de gate aplicado diretamente ao PQ cujo efeito é o deslocamento rígido de seus níveis de energia.

Figura 5 : 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).



Fonte: Retirado de [41] (2010), adaptado pelo autor.

A análise das propriedades de transporte do sistema F-PQ-S será realizada em dois regimes: zero-bias e com bias finita. O regime de zero-bias permite analisar a função dos acoplamentos

entre o PQ e os eletrodos bem como do potencial de gate. No caso do regime de bias finita a variação da densidade local de estados do PQ com a energia será preponderante na determinação das propriedades de transporte do sistema. Todos os resultados abaixo descritos são considerados dentro do regime de reflexão de Andreev o qual é definido para valores de energia dos elétrons inferiores ao gap de energia supercondutor. Deste modo, a escala natural de energia é gap supercondutor e , portanto, todas as demais unidades serão expressas em unidades do gap de energia.

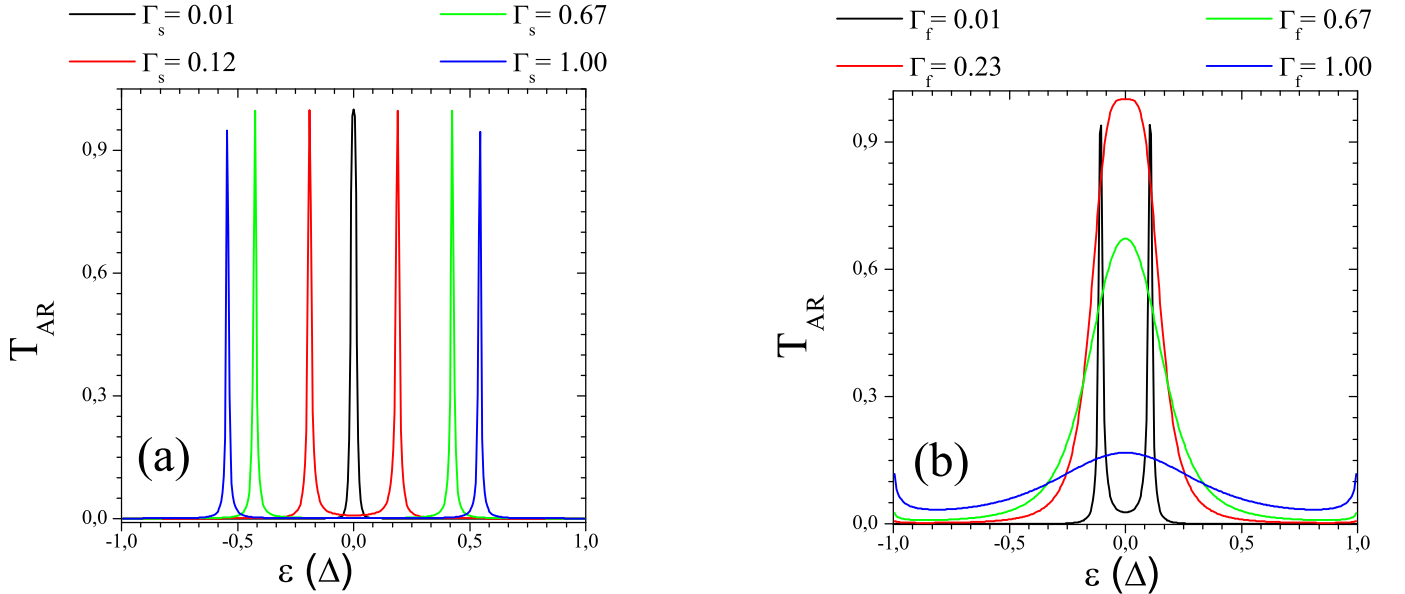
O sistema ilustrado na Fig. 5 é caracterizado pela polarização P do ferromagneto, cuja definição é dada pela Eq. (28) do capítulo 2; os acoplamentos entre o PQ e os eletrodos ferromagnético e supercondutor, Γ_f e Γ_s , respectivamente; o potencial de gate V_g e a intensidade da interação elétron-elétron U dentro do PQ. No regime de zero-bias a quantidade relevante para caracterizar o transporte eletrônico por meio do PQ é determinado pela chamada transmitância, T_{AR} , que determina a probabilidade de transmissão de elétrons através do PQ. Desde que os elétrons são injetados por meio de reflexão de Andreev, foi incluído na transmitância por um índice AR para evidenciar este processo.

3.1.1 Transmitância em zero-bias

Na Fig. 6 são ilustradas algumas curvas para a transmitância, T_{AR} , em função da energia dos elétrons, ε , no PQ. Em particular, na Fig. 6a, o acoplamento entre o ferromagneto e o PQ é mantido fixo e igual a $\Gamma_f = 0.01$ enquanto algumas curvas demonstram a evolução da transmitância para diferentes valores do acoplamento entre o PQ e o supercondutor, Γ_s . Para $\Gamma_s = 0.01$, a transmitância é dominada pelo acoplamento com o ferromagneto e o resultado é uma curva com um único pico centrado em $\varepsilon = 0$. À medida que o acoplamento com o supercondutor aumenta, o pico divide-se em dois novos picos dispostos simetricamente em relação a $\varepsilon = 0$. Estes dois picos localizados em energias positiva e negativa correspondem a estados de elétron e buraco, respectivamente, e correspondem aos estados ligados de Andreev. Estes estados são induzidos no PQ devido ao chamado efeito de proximidade com o supercondutor e representam a probabilidade finita dos elétrons no PQ serem transferidos ao supercondutor na forma de pares de Cooper. Aumentado-se o acoplamento com o supercondutor, a separação dos picos aumenta conforme pode-se notar comparando-se as curvas vermelha, verde e azul da Fig. 6(a).

Na Fig. 6(b) considera-se a variação do acoplamento com o ferromagneto mantendo-se o acoplamento com o supercondutor fixo em $\Gamma_s = 0.12$, ou seja, como na curva preta da Fig. 6(a). Nota-se que aumentando o acoplamento com o ferromagneto, o efeito é de produzir um alargamento do pico central que cresce com Γ_f . Com efeito, para $\Gamma_f > 0.2$ não é possível

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.



Fonte: Elaboração do próprio autor.

verificar a separação dos estados de Andreev uma vez que os picos estão alargados que tornam-se apenas um pico central. A medida que Γ_f aumenta ainda mais o efeito é a redução da amplitude do pico para toda a janela definida pelo gap supercondutor. Isso pode ser verificado na curva azul para $\Gamma_f = 1.00$. É importante notar que a área abaixo da curva da transmitância deve permanecer constante para a conservação da probabilidade ser mantida, deste modo, o efeito do alargamento do pico deve ser acompanhado pela correspondente redução de sua amplitude.

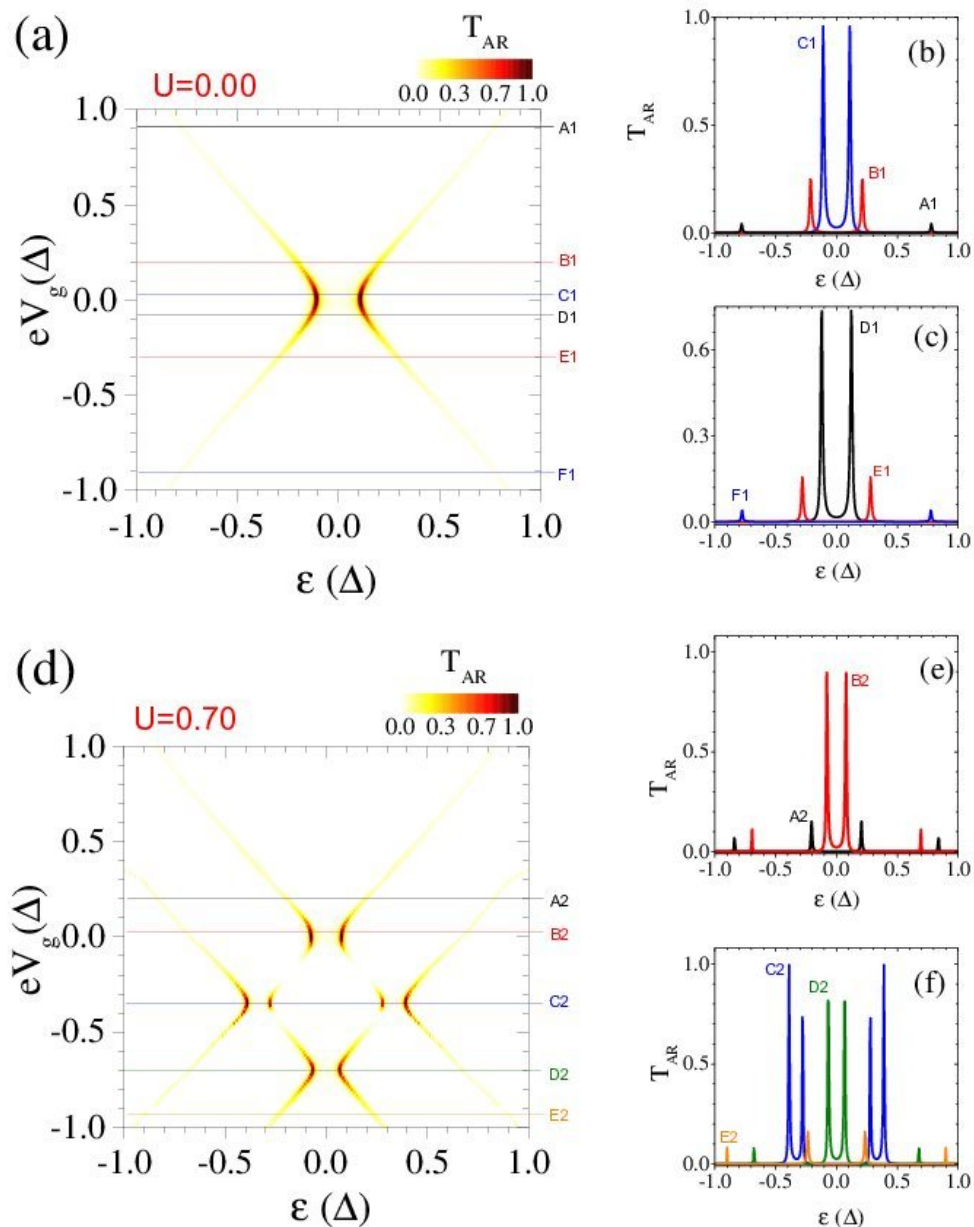
É importante destacar a diferença entre as variações dos acoplamentos Γ_s e Γ_f . O acoplamento com o supercondutor introduz dois picos no espectro da transmitância enquanto que o acoplamento com o ferromagneto induz um alargamento do pico. A diferença reside na estrutura de bandas de cada eletrodo: no caso do supercondutor, o PQ é acoplado a dois níveis discretos relacionados com os estados de Andreev. Estes estados discretos residem no interior do gap supercondutor e são representados por funções de onda exponencialmente decrescentes. Desta forma, elétrons que entram no supercondutor por meio do PQ têm um tempo de vida finito e propagam-se a curtas distâncias até se combinarem com um segundo elétron e condensarem na forma de pares de Cooper; por outro lado, o ferromagneto apresenta um espectro

contínuo que se mistura com o nível discreto do PQ produzindo o seu alargamento. Desta forma, o alargamento representa a hibridização do nível discreto com o *continuum* de estados do ferromagneto.

A figura 7 ilustra o efeito da interação elétron-elétron dentro do PQ. Na Fig. 7 são apresentados gráficos na forma de curvas de nível cuja escala de cor representa a transmitância em função da energia dos elétrons ε e do potencial de gate V_g . O caso não-interagente $U = 0$ é mostrado na Fig. 7(a) onde os estados de Andreev podem ser evidenciados. Nota-se que o efeito do potencial de gate é induzir a separação dos picos de Andreev conforme pode ser claramente verificado. As linhas horizontais rotuladas por A1 até F1 correspondem aos perfis indicados nas Figs. 7(b) e 7(c). Nestes gráficos pode-se notar claramente a evolução dos níveis de Andreev com a variação do potencial de gate. Na Fig. 7(d) a curva de nível para o caso interagente, $U = 0,70$, é mostrado. Nota-se uma mudança bastante clara em comparação com o caso $U = 0$. O efeito da interação é a divisão de cada pico de Andreev em dois, resultando em um padrão de até quatro picos para determinados valores do potencial de gate. Isso é evidente em todos os perfis ilustrados nas Figs. 7(e) e 7(f). A razão para tal separação adicional é o levantamento da degenerescência de spin do nível do PQ. Para $U = 0$, ambos os níveis de spin up e spin down apresentam o mesmo valor de energia ε_d . Quando a interação é ligada, i.e., para $U \neq 0$, os níveis são separados pelo valor de U devido à interação Coulombiana entre os dois elétrons que são injetados no PQ. Desta forma, um elétron estará situado no nível de energia ε_d enquanto que o segundo elétron injetado terá energia igual a $\varepsilon_d + U$ onde U é o valor de energia adicional que deve ser colocada para manter o segundo elétron no PQ.

Na Fig. 8 são considerados os efeitos da polarização sobre a transmitância do sistema F-PQ-S. A polarização determina a proporção de elétrons de spin up e down que são injetados no PQ. O efeito da polarização é importante no processo de reflexão de Andreev devido ao alinhamento de spin dos elétrons que formam os pares de Cooper no supercondutor. No caso presente, o supercondutor é descrito pelo modelo BCS onde os pares de Cooper apresentam alinhamento singleto, i.e., elétrons com spins opostos. Como resultado, no processo de reflexão de Andreev, um elétron com spin up deve ser refletido como um buraco de spin down de modo que um par de Cooper singleto seja formado no supercondutor. Deste modo, para o caso em que o ferromagneto está completamente polarizado ($P = 1$), somente um tipo de spin é injetada no PQ e, portanto, a reflexão de Andreev é proibida e a transmitância é zero. Na Fig. 8(a), várias curvas $T_{AR}(\varepsilon)$ para P variando de 0 até 1 são apresentadas e nota-se que a transmitância primeiro aumenta até um valor máximo e então é reduzida rapidamente a zero para $P \rightarrow 1$. Este comportamento contrasta com a Fig. 8(b) onde a polarização apresenta uma redução monotônica a zero com o aumento da polarização. A diferença entre os dois casos

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.



Fonte: Elaboração do próprio autor.

está na razão entre os acoplamentos $r = \Gamma_s/\Gamma_f$ a qual é igual 0.1 e 1 para as Figs. 8(a) e 8(b), respectivamente. É possível mostrar que a transmitância em $\varepsilon = 0$ irá apresentar um valor máximo quando a condição $P^2 + r^2 = 1$ for satisfeita. Neste caso, para um determinado valor da polarização P , todos os elétrons que entram no PQ são refletidos como buraco formando um par de Cooper no supercondutor. Quando a condição não é satisfeita, parte dos elétrons sofrem uma reflexão convencional, i.e., são refletidos como elétrons e não transferem carga para o supercondutor. Neste caso, o processo de reflexão de Andreev é menos efetivo e é fortemente reduzido à medida que a polarização aumenta. Este comportamento é bastante conhecido em junções ferromagnéticas/supercondutoras[42] onde a condição de máximo é estabelecida em termos das velocidades de Fermi dos elétrons no supercondutor e no ferromagneto, ou seja, a reflexão de Andreev apresentava um máximo quando $v_{f\uparrow}v_{f\downarrow} = v_s^2$ onde $v_{f\sigma}$ é a velocidade dos elétrons de spin σ no ferromagneto e v_s é a velocidade dos elétrons no supercondutor. A condição para o sistema F-PQ-S dada por $P^2 + r^2 = 1$ pode ser reescrita na forma $\Gamma_{f\uparrow}\Gamma_{f\downarrow} = \Gamma_s^2$ que é análoga ao caso da junção ferromagnética/supercondutora. Esta condição para sistemas híbridos envolvendo PQs foi primeiro descoberta por Zhu, Sun e Lin [43] para um sistema envolvendo dois eletrodos ferromagnéticos e um supercondutor acoplados ao PQ.

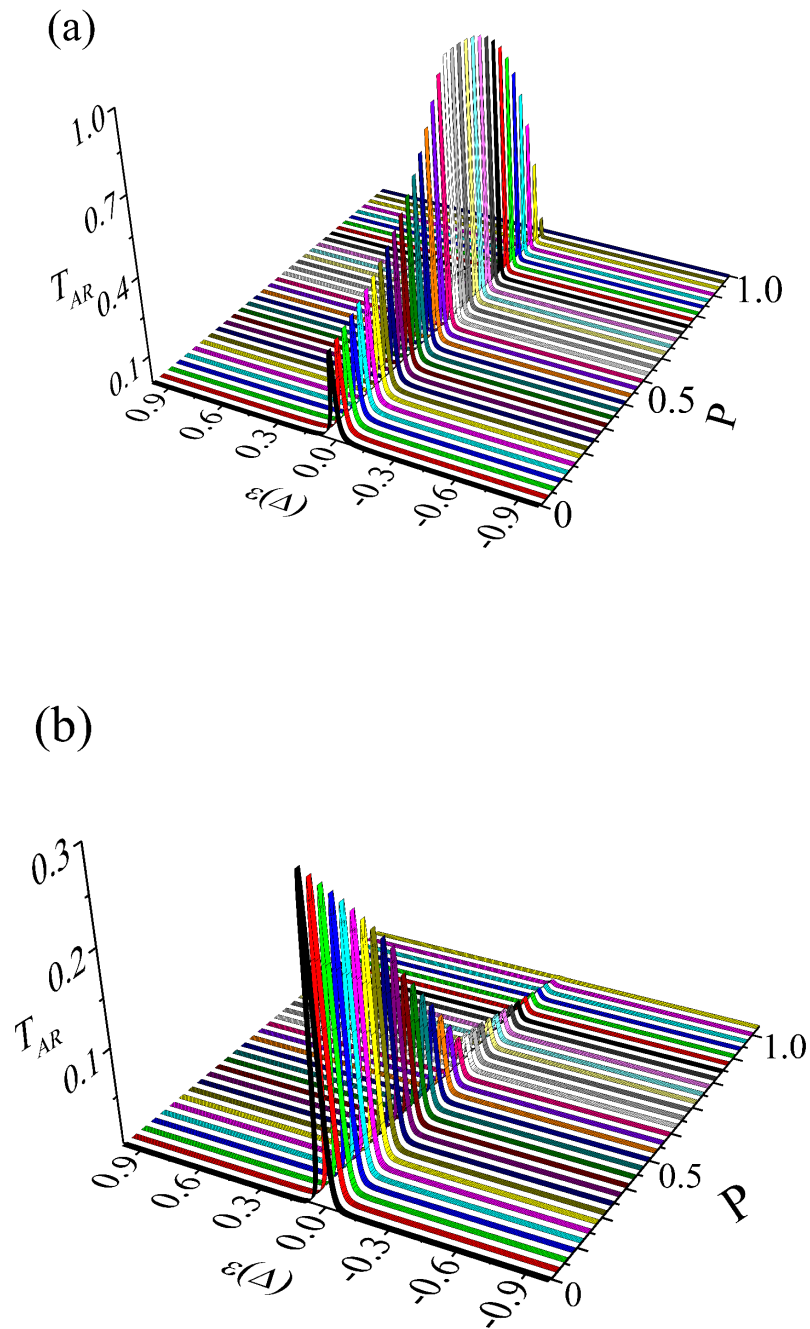
3.1.2 Resultados para bias finita

Até o momento foi considerada a ausência de potencial aplicado ao ferromagneto. Nesta seção será considerado o efeito de um valor finito de bias aplicado ao ferromagneto sobre a ocupação do PQ bem como da corrente elétrica que flui através do PQ.

3.1.2.1 Número de ocupação

Aqui será considerada a variação do número médio de ocupação do PQ para um valor finito de potencial de bias aplicado ao ferromagneto. Para polarização $P = 0$, ambos os spins, up e down, apresentam curvas idênticas para a ocupação. É importante notar que existe uma corrente fluindo do ferromagneto para o supercondutor de modo que a ocupação no PQ flutua em torno de um valor médio dado pela Eq. (35). Na Fig. 9(a) é mostrada a variação da ocupação $\langle \hat{n}_\sigma \rangle$, $\sigma = \uparrow, \downarrow$, como função do potencial de gate V_g e do potencial de bias V . No cálculo desta ocupação, os valores das constantes de acoplamento (Γ_f e Γ_s) foram escolhidos de modo que, o pico das curvas obtidas para o elétron e buraco estão sobrepostos, ou seja, como se houvesse somente um pico. Como resultado, $\langle \hat{n}_\sigma \rangle$ apresenta uma topologia semelhante a um degrau onde a ocupação varia rapidamente do valor unitário para o valor 0. Este comportamento pode ser facilmente entendido considerando o quadrante onde ambos os potenciais são positivos. O

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.



Fonte: Elaboração do próprio autor.

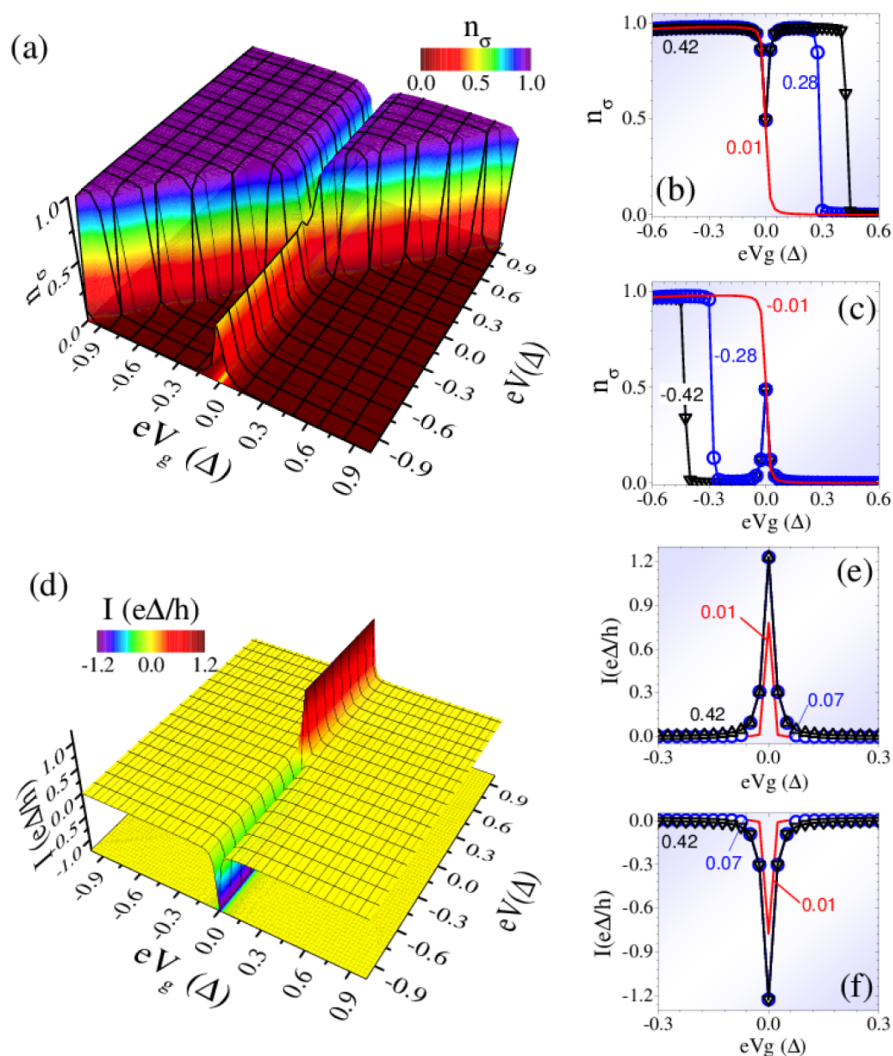
PQ estará preenchido com elétrons quando o nível do PQ estiver abaixo do nível de Fermi do ferromagneto, fixado pelo potencial de bias, quando $V > 0$. Neste caso, é favorável que os elétrons ocupem o PQ. O nível do PQ, por sua vez, pode ser deslocado por meio do potencial de gate e, deste modo, quando o potencial de gate apresenta um valor menor do que o nível do ferromagneto o PQ apresenta ocupação unitária, caso contrário, o PQ é esvaziado com os elétrons sendo transferidos para o ferromagneto. As regiões de ocupação unitária e ocupação nula são, portanto, definidas pela linha dada por $V = V_g$ conforme pode ser claramente visto na Fig. 9(a).

A assinatura do acoplamento com o supercondutor aparece na forma de uma ressonância (ou uma antiressonância) para o potencial de bias negativo (positivo). É importante notar que o potencial químico do metal supercondutor (μ_s) está localizado em $\varepsilon = 0$, i.e., no meio do gap supercondutor. Deste modo, quando o potencial de gate é ajustado de modo que o nível do PQ esteja alinhado com μ_s é favorável que os elétrons no PQ sejam transferidos para supercondutor por meio da reflexão de Andreev, para $V > 0$, ou removidos do supercondutor para $V < 0$. No caso em que $V > 0$ há uma drástica redução da ocupação que está próxima de 1 para valores próximo de zero. Isso pode ser melhor visualizados nas curvas correspondentes que aparecem nas Figs. 9(b) e 9(c). Na Fig. 9(d), a corrente elétrica injetada no supercondutor é mostrada onde pode-se notar claramente que esta apresenta um pico que coincide com a localização da ressonância/antiressonância que aparece na curva de ocupação. Isto pode ser melhor visualizado nos perfis correspondentes mostrados nas Figs. 9(e) e 9(f).

Analisando a ocupação na figura 10, considerando $P \neq 0$, temos que quando $V > 0$, o número de ocupação de spin up é menor do que o número de ocupação de spin down ($n_\uparrow < n_\downarrow$), isso ocorre pois no pico de ressonância, dois elétrons são convertidos em par de Cooper por meio da reflexão Andreev no supercondutor. Quando há variação do gate, a ocupação média diminui pois mais elétrons de um tipo de spin estão sendo injetados a partir do ferromagneto. No caso da figura 10(b), mais elétrons de spin down estão sendo injetados no supercondutor. Para $V < 0$ temos que $n_\uparrow > n_\downarrow$, ou seja, mais elétrons de spin up estão sendo injetados no supercondutor, por causa da diferença da amplitude dos picos.

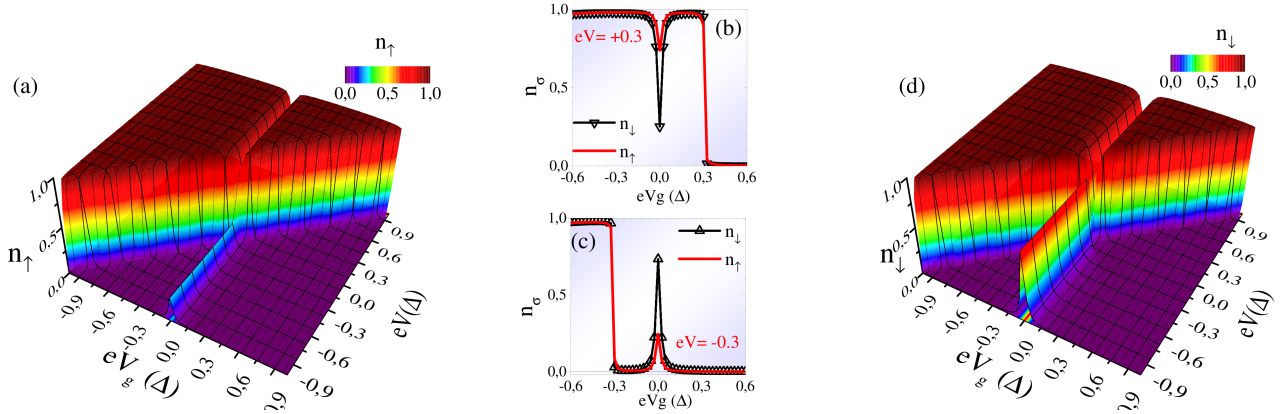
Para $P \neq 0$, as ocupações para spin up e spin down serão diferentes visto que a injeção de elétrons para cada spin apresentará uma taxa diferente. Com efeito, a taxa com que os elétrons são injetados no PQ é definida pela razão Γ_f/h , onde h é a constante de Planck. Deste modo, para $P \neq 0$ haverá duas taxas $\Gamma_{f\uparrow} = \Gamma_f(1 + P)$ e $\Gamma_{f\downarrow} = \Gamma_f(1 - P)$. Na Fig. 10 são apresentadas as ocupações médias $\langle \hat{n}_\uparrow \rangle$ e $\langle \hat{n}_\downarrow \rangle$ em função dos potenciais de bias e de gate. Nota-se que existe uma diferença entre estas ocupações na ressonância/antiressonância de Andreev localizada em

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 potencial. (c) Ocupação no PQ em função do gate e de bias voltagens. (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.



Fonte: Elaboração do próprio autor.

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.



Fonte: Elaboração do próprio autor.

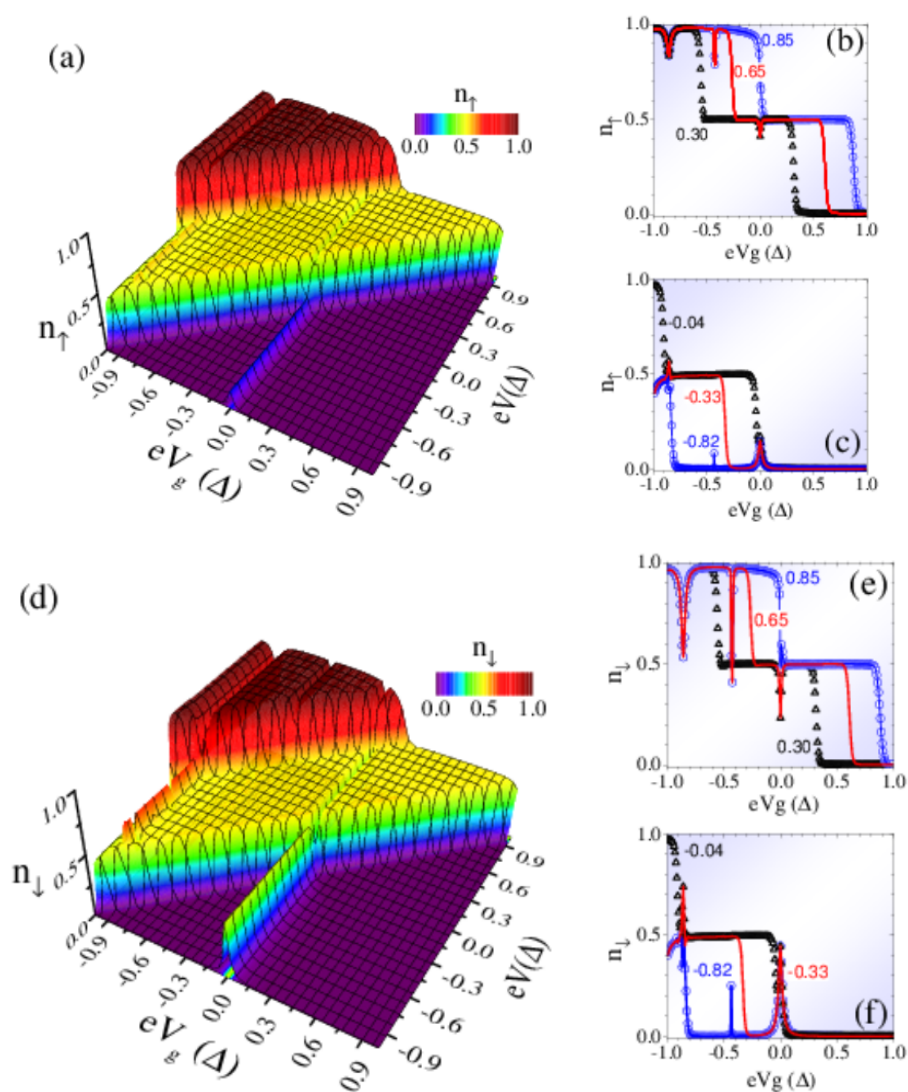
$V_g = 0$. Para $V > 0$, a reflexão de Andreev aparece como uma antiressonância nas curvas de ocupação conforme pode ser melhor visualizado na Fig. 10(b), onde as curvas para $\langle \hat{n}_{\uparrow} \rangle$ e $\langle \hat{n}_{\downarrow} \rangle$ são comparadas para $eV = +0.30$. Neste caso, a antiressonância para a curva de spin up apresenta uma variação maior do que a correspondente para spin down gerando um acúmulo deste tipo de spin no PQ.

Para entender este comportamento, é necessário perceber que o ferromagneto injeta elétrons no PQ com taxas diferentes para spin up e down; o supercondutor, por outro lado, retira os elétrons do PQ com taxas idênticas e iguais a Γ_s/h . Deste modo, como a taxa de “reposição” de elétrons de spin down pelo ferromagneto é menor do que a taxa de retirada destes elétrons pelo supercondutor, o resultado global é um acúmulo de spin up no PQ. O mesmo raciocínio vale para explicar o acúmulo de spin para o caso $V < 0$, detalhado na Fig. 10(c) para $eV = -0.30$. Neste caso, o PQ é carregado pelo supercondutor com elétrons de spin up e down a taxas iguais, porém, os elétrons de spin up são retirados a uma taxa maior pelo ferromagneto do que os elétrons de spin down. Como consequência, um acúmulo de spin down no PQ é estabelecido.

Este resultado é relevante do ponto de vista da *spintrônica* pois consiste em um método de “escrever” um spin no PQ por meio da aplicação de um potencial elétrico. Este spin pode ser utilizado como um bit de informação, onde a informação binária (0 ou 1) corresponde ao estado magnético do PQ (com acúmulo de spin up ou spin down).

Os resultados apresentados até o momento foram obtidos considerando a ausência de correlações eletrônicas no interior do PQ ($U = 0$). Quando estas correlações estão presentes, as

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.



Fonte: Elaboração do próprio autor.

curvas de ocupação assumem a forma ilustrada na Fig. 11. A principal diferença em comparação com o caso não-interagente é o surgimento de um platô intermediário de ocupação unitária [região amarela nas superfícies das Figs. 11(a) e 11(d)]. Este platô surge devido ao levantamento da degenerescência de spin desde que o nível degenerado do PQ, ε_d , apresenta um desdobramento em ε_d e $\varepsilon_d + U$. O platô aparece quando o nível de Fermi (ε_f), fixado pelo potencial de bias do ferromagneto, está situado no intervalo $\varepsilon_d < \varepsilon_f < \varepsilon_d + U$. Comparando as curvas apresentadas nas Figs. 11(b) e 11(e), é possível notar que o efeito de acúmulo de spin ainda persiste para $V_g = 0$, $V_g = U/2$ e $V_g = U$ que corresponde à localização das três ressonâncias que aparecem nas curvas de transmitância T_{AR} . Estas três ressonâncias são resultado da divisão adicional dos picos de elétron e buraco da transmitância devido aos efeitos da interação. O efeito também aparece para valores negativos do potencial de bias conforme pode ser observado comparando as curvas das Figs. 11(c) e 11(f).

3.2 Sistema F-PQ-S com acoplamento direto entre os eletrodos

Nesta seção será analisado o sistema completo com a presença do acoplamento direto entre os eletrodos ferromagnético e supercondutor além do acoplamento com o PQ que foi estudado na seção anterior. O sistema completo é ilustrado na Fig. 4 onde pode-se observar que os dois acoplamentos entre os eletrodos permite definir uma geometria na forma de anel. Esta geometria permite a aplicação de um campo magnético transversal através da seção reta do anel permitindo com isso alterar a fase da função de onda dos elétrons que são injetados no supercondutor. Conforme será demonstrado abaixo, isso altera as propriedades de transporte do sistema. Deste modo, dois parâmetros adicionais que caracterizam esta nanoestrutura aparecem nesta seção: a intensidade de acoplamento, Λ , entre os eletrodos; e o fluxo magnético, ϕ , que atravessa o anel formado pelos acoplamentos. É importante notar que $\Lambda = \pi\rho_0V_{fs}$ e, portanto, é uma grandeza adimensional. Neste trabalho, será considerado a variação de Λ dentro do intervalo $0 < \Lambda < 1$ em que o acoplamento é comparável às demais escalas de energia para o problema, em particular, às constantes de acoplamento Γ_f e Γ_s .

3.2.1 Transmitância em zero-bias

Na figura 12a é mostrada a transmitância T_{AR} em função da energia do elétron no PQ, ε , e da constante de acoplamento direto, Λ . Para $\Lambda = 0$ recupera-se os resultados previamente obtidos para o sistema F-PQ-S, i.e., duas ressonâncias equidistantes de $\varepsilon = 0$ correspondentes aos estados ligados de Andreev. A medida que o acoplamento, Λ , aumenta o perfil muda completamente. Para $\Lambda \cong 1.0$ o perfil da transmitância é invertido em relação a $\Lambda = 0.05$: a transmitância

apresenta valor unitário em todo o intervalo, exceto em $\varepsilon = 0$, no qual a transmitância apresenta valor nulo. Nas Fig. 12b e 12c são mostrados dois perfis para $\Lambda = 0.05$ e $\Lambda = 0.95$ onde pode-se notar a modificação da forma da transmitância.

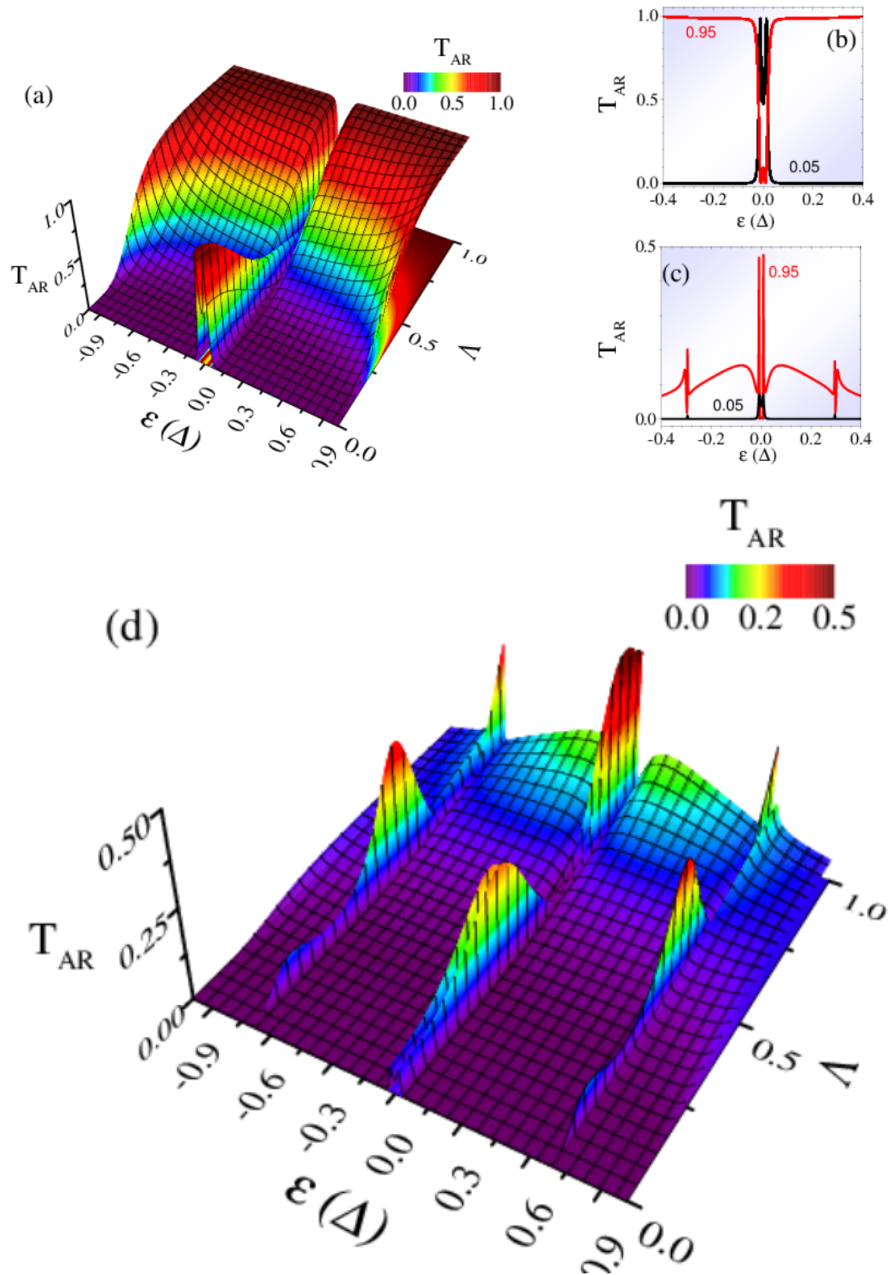
Este tipo de comportamento é resultado da interferência entre os dois caminhos possíveis para o elétron ser conduzido ao metal supercondutor. De fato, o elétron pode sofrer reflexão de Andreev através do acoplamento direto entre o ferromagneto e o supercondutor ou através do PQ. A interferência entre estes dois caminhos caracteriza o comportamento quântico dos elétrons que fazem parte do processo de transporte.

A interferência entre dois caminhos diferentes é um fenômeno ondulatório bastante conhecido na literatura e é uma das assinaturas do comportamento quântico da matéria. Uma das ilustrações mais relevantes deste tipo de comportamento foi o experimento conduzido por Aharonov & Bohm (AB) [32] que estudaram a interferência entre dois feixes de elétrons que eram divididos em um determinado ponto e então recombinavam-se novamente conforme mostrado na Fig. 13.

O aspecto principal do experimento acima descrito é o fato do campo magnético que atravessa o cilindro não interagir diretamente com o feixe eletrônico ($\vec{B} = 0$ fora do cilindro) e ainda assim é capaz de produzir efeitos sobre a interferência entre os feixes divididos. Isto deve-se ao potencial vetor magnético $\vec{B} = \nabla \times \vec{A}$ ser diferente de zero fora do cilindro, então esse campo entra como uma fase adicional na função de onda dos elétrons.

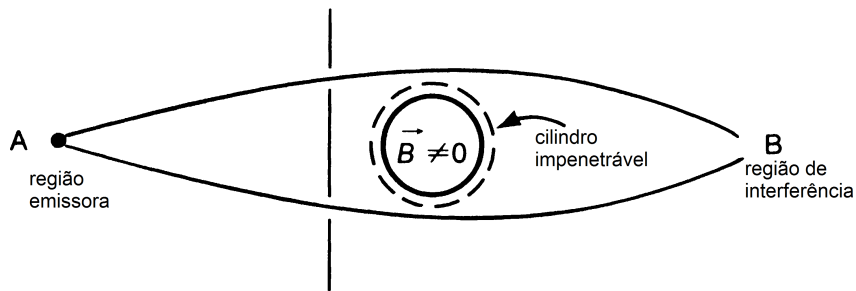
O processo de interferência aqui descrito é diferente do experimento realizado por Aharonov-Bohm em vários aspectos, no entanto, é importante destacar a diferença em relação ao caráter dos estados dos elétrons envolvidos nos processos. No caso do experimento de AB o espectro de energia dos elétrons é contínuo visto que trata-se de dois feixes de elétrons livres. No caso deste trabalho existe uma correlação entre estados contínuos devido ao ferromagneto e estados discretos devido ao PQ e ao supercondutor. Assim, o efeito assemelha-se à chamada interferência Fano que ocorre entre um *continuum* de estados e um estado discreto. Este efeito foi originalmente observado em espectros de emissão de hidrogênio e explicados por U. Fano baseando-se na interferência entre os estados discretos dos átomos com um espectro de energia contínuo oriundo do banho térmico ao qual o átomo estava acoplado. Este efeito também é observado em nanoestruturas e a assinatura da interferência Fano, neste caso, é a inversão da transmitância desde um padrão de ressonância para um padrão de antirressonância. Uma curva típica de uma transmitância é mostrada na Fig. 14 onde é possível observar claramente a evolução da transmitância para diferentes valores do fator q que caracteriza a razão entre as intensidades dos acoplamentos. A expressão para o fator de Fano (q) é obtida diretamente da expressão da

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.



Fonte: Elaboração do próprio autor.

Figura 13 : Representação esquemática do experimento de Aharonov-Bohm.



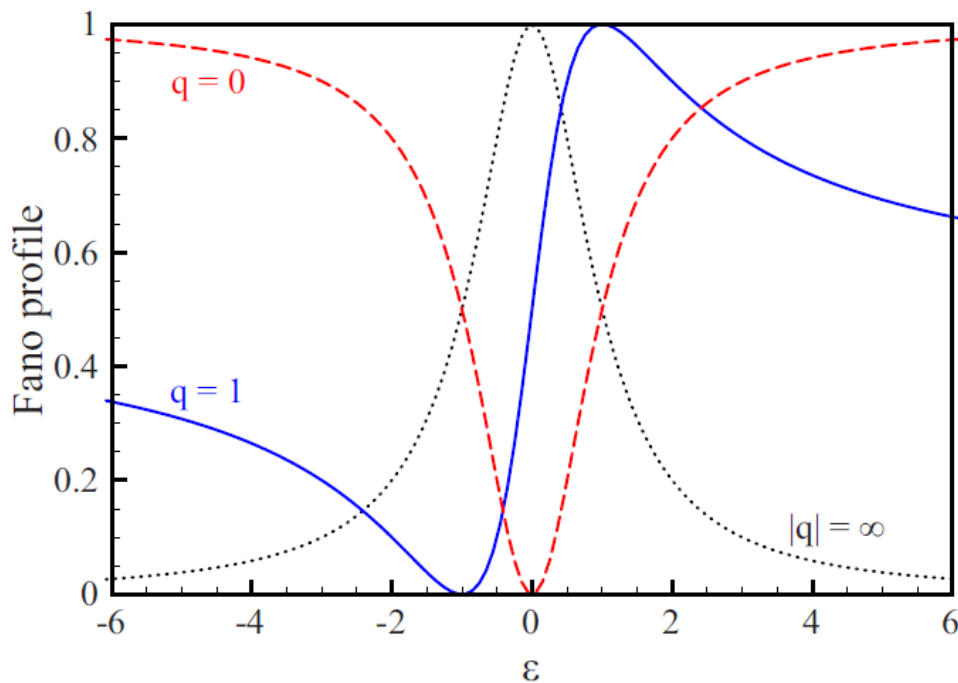
Fonte: Retirado de [44] (1994),

transmitância. Quando $q = 0$ os elétrons passam preferencialmente pelo acoplamento direto enquanto que para $q \rightarrow \infty$ os elétrons tunelam preferencialmente pelo estado discreto entre os eletrodos. A transmitância dada evolui desde uma ressonância até uma antirressonância conforme pode ser observado na Fig. 14. O fator Fano q em geral pode ser obtido diretamente da expressão da transmitância, no entanto, para o sistema estudado neste trabalho não é possível derivar uma expressão simples para a transmitância de modo a identificar claramente a forma do fator q . Deste modo, para determinar a assimetria entre os acoplamentos direto e com o PQ será utilizado o parâmetro Λ .

Na Fig. 12(d) é mostrada a transmitância para o caso interagente onde o levantamento da degenerescência de spin gera duas ressonâncias adicionais localizadas em $\varepsilon \sim \pm 0.85$. Analisando a variação com o parâmetro Λ , os efeitos aqui são distintos em comparação com o caso $U = 0$. Com efeito, na Fig. 12(c) são mostradas duas curvas representativas para $\Lambda = 0.05$ e $\Lambda = 0.95$ onde observa-se que as ressonâncias adicionais apresentam a conversão para antirressonâncias, porém, as ressonâncias centrais não são modificadas. Isso ocorre devido ao fato da correlação alterar o espectro discreto do PQ e, por consequência, as condições de ocorrência das ressonâncias. Como resultado, a condição da interferência Fano também é alterada.

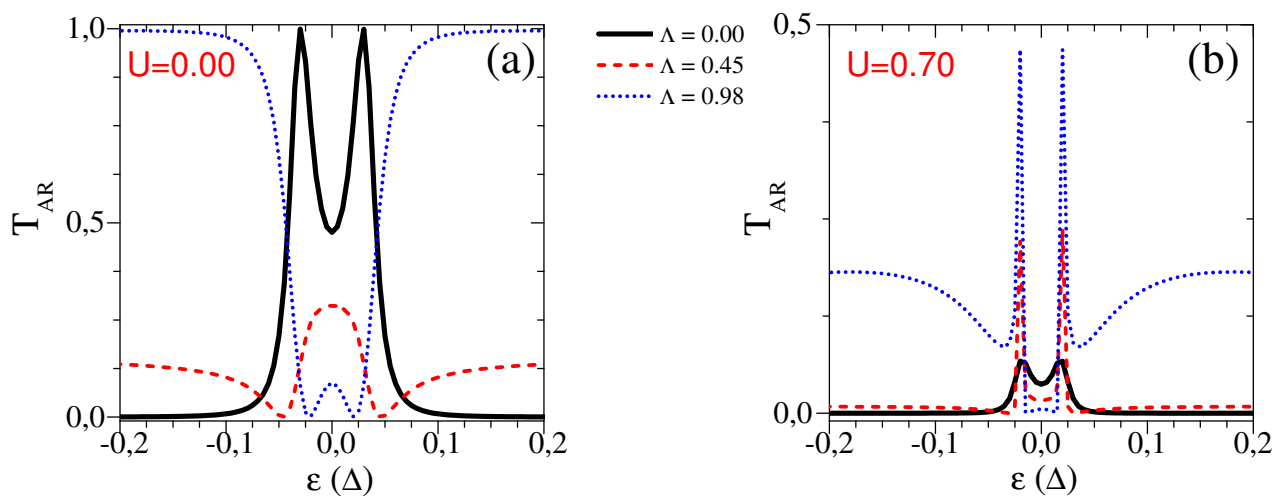
Nas curvas obtidas na Fig. 12, a constante de acoplamento foi fixada em $\Gamma_f = 0.01$ enquanto $\Gamma_s = 0.03$. É interessante verificar o que ocorre dentro da escala de Γ e, por esta razão, na Fig. 15 são mostradas as curvas da transmitância para $-0.2 < \varepsilon < 0.2$ e $\Lambda = 0, 0.45$ e 0.98 . Na Fig. 15(a) são mostradas as curvas para o caso não-interagente $U = 0$, onde pode-se notar a evolução de duas ressonâncias para $\Lambda = 0$ para uma antirressonância quando $\Lambda = 0.95$. No entanto, para o caso da antirressonância existe um pequeno pico central cuja intensidade é mais alta para $\Lambda = 0.45$ mas que ainda existe para $\Lambda = 0.95$. Esta ressonância é uma assinatura dos estados ligados de Andreev e não aparece no caso em que os eletrodos conectados ao PQ são

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.



Fonte: Retirado de [17] (2010).

Figura 15 : Detalhes das curvas da T_{AR} para $-0.2 < \varepsilon < 0.2$ 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.



Fonte: Elaboração do próprio autor.

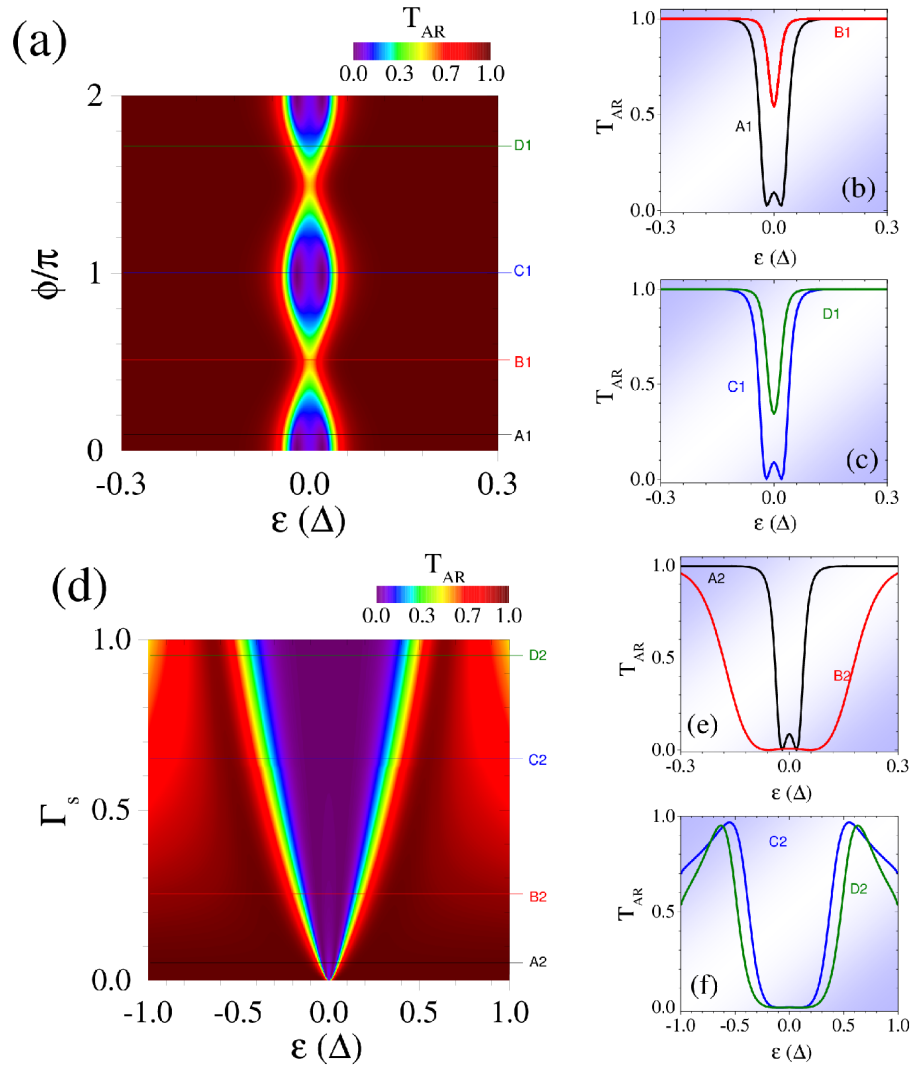
metais normais. Este tipo de efeito ainda não foi reportado para sistemas com a geometria estudada neste trabalho. No entanto, existem trabalhos envolvendo nanoestruturas com geometrias diferentes em que a transmitância se assemelha às curvas da Fig. 15(a). A origem do efeito está na relação entre diferentes caminhos tomado pelos elétrons dentro da nanoestrutura e os estados ligados de Andreev[45, 46]. Estes efeitos são denominados interferência tipo Fano porque existe a conversão de uma ressonância em antiressonância do modo semelhante ao que ocorre com o efeito Fano originalmente observado em nanoestruturas. Na Fig. 15(b) a transmitância para o caso interagente é mostrada para os mesmos valores dos demais parâmetros usados na Fig. 15(a). Nota-se que a interferência Fano é completamente suprimida e as curvas mantêm a mesma forma que $\Lambda = 0$ exceto que as ressonâncias são reforçadas conforme pode ser verificado comparando-se as curvas para $\Lambda = 0$ (curva preta-sólida) com a curva para $\Lambda = 0.95$ (curva azul-pontilhada). Conforme previamente discutido, o efeito da interação é o levantamento da degenerescência de spin causando a separação dos níveis de spin up e spin down em ϵ_d e $\epsilon_d + U$. A alteração das propriedades espectrais do PQ altera completamente o perfil da transmitância e, por conseqüência, as condições de ressonância e antiressonância.

Na figura 16 é mostrada a dependência de T_{AR} com a variação de um campo magnético no sistema. É suposto que um fluxo magnético atravessa perpendicularmente o anel formado pelo PQ e o acoplamento direto entre os eletrodos. Ao variar o campo magnético, é possível modificar a fase relativa ϕ dos elétrons que tunelam pelos diferentes caminhos da nanoestrutura. Esta fase varia no intervalo $0 < \phi < 2\pi$ gerando um padrão oscilatório de interferência. Na curva de nível apresentada na Fig. 16(a) pode-se notar o padrão oscilatório de T_{AR} a medida que a fase ϕ varia de 0 a 2π . Nota-se também, nas Figs. 16(b) e 16(c), que o pico central que aparece na antiressonância está presente nas curvas A1 e C1 mas está ausente nas curvas B1 e D1. Isto indica claramente que este pico central está realmente relacionado com efeitos de interferência associado aos diferentes caminhos dos elétrons. Na Fig. 16(d) o efeito do acoplamento com o supercondutor Γ_s é considerado e observa-se das curvas correspondentes nas Figs. 16(e) e 16(f) que o pico central da antiressonância está presente somente para valores de Γ_s da ordem de $\Gamma_f = 0.01$. Com efeito, a medida que Γ_s aumenta, o pico central é suprimido e padrão convencional da antiressonância Fano é recuperado.

3.2.2 Efeitos de interferência em bias finita

Nesta seção os efeitos da aplicação de um potencial de bias serão estudados. A presença da interação no interior do PQ introduz a dependência de todas as quantidades físicas com a ocupação do PQ, a qual, por sua vez, depende dos potenciais de bias e de gate. Por esta razão,

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) classificados por A1, B1, C1 e D1 são mostrados para $\phi = 0.09\pi, 0.50\pi, \pi$ 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.



Fonte: Elaboração do próprio autor.

a dependência da transmitância com a energia fica muito complicada, pois, para cada valor do potencial o espectro de energia do PQ muda e, com isso, mudam-se as condições de ressonância e antiressonância para a transmitância.

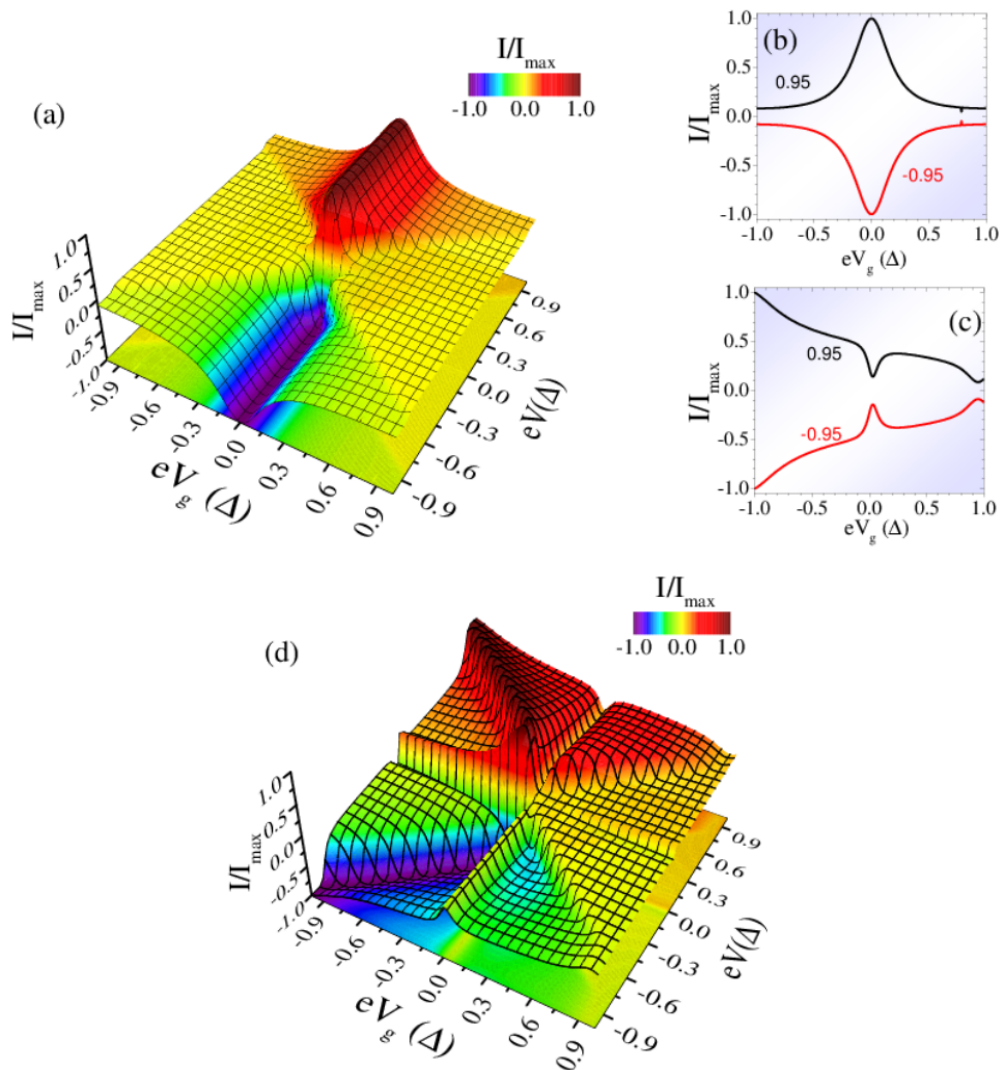
3.2.2.1 Corrente elétrica

Quando a corrente elétrica é calculada para valores não-nulos de polarização, bem como para diferentes valores do acoplamento Λ , é conveniente trabalhar com a corrente normalizada pelo seu valor máximo, permitindo comparar várias curvas dentro da mesma escala. A corrente elétrica através do sistema como função dos potenciais de bias e de gate é mostrada na Fig. 17. Quando $\Lambda = 0$, a corrente elétrica apresenta um valor máximo em $eV_g = 0$ relacionado resultado da transmitância apresentar um perfil de apenas um pico, resultado dos valores usados para as constantes de acoplamento, $\Gamma_f = 0.05$ e $\Gamma_s = 0.10$. Quando o acoplamento direto entre os eletrodos é diferente de zero, a superfície da corrente elétrica assume a forma dada pela Fig. 17(d). Nota-se que existe claramente uma inversão do comportamento da corrente: onde existe uma ressonância para $\Lambda = 0$ agora existe uma antiressonância. Isto pode ser verificado comparando-se os perfis apresentados nas Figs. 17(b) e 17(c).

A figura 17(a) é semelhante a figura 9(d), sendo que o acoplamento com o ferromagneto usado aqui é maior. Neste caso, os picos das figuras 17(b) e 17(c) são mais alargados do que os da figuras 9(e) e 9(f), justamente por causa do acoplamento. Sendo assim, há a alteração no transporte de uma ressonância para uma antiressonância. Ligando o acoplamento lead-lead (Λ), nota-se que a antiressonância que havia na corrente para valores negativos de eV [figura 17(a)], agora se torna um pico. Enquanto que a região vermelha da figura 17(a), onde $eV_g = 0$, era um pico, após ligado o acoplamento essa região tornou-se uma antiressonância.

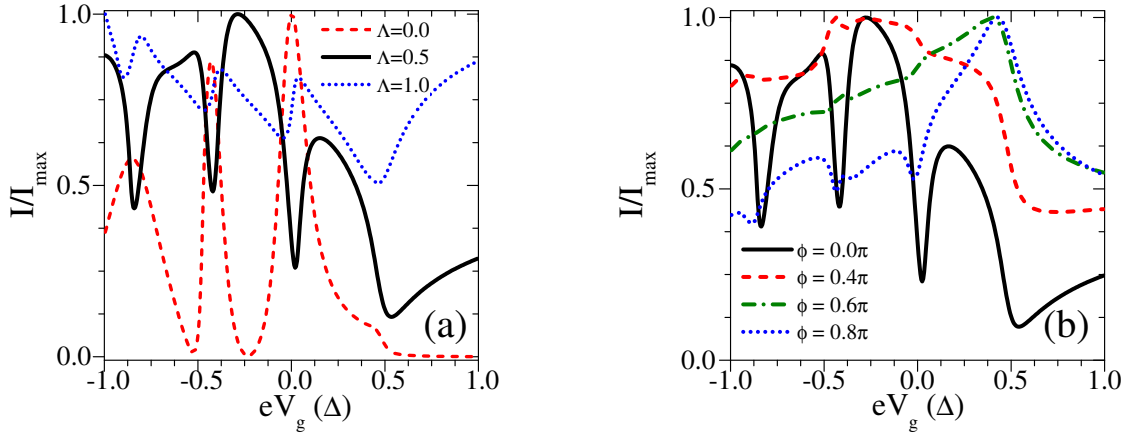
Na Fig. 18, a corrente elétrica para $eV = 0.45$ em função do potencial de gate é ilustrada para alguns valores da constante de acoplamento e da fase ϕ . Para $\Lambda = 0$, a corrente elétrica apresenta três picos refletindo a estrutura ressonante da transmitância [curva vermelha-tracejada, Fig. 18(a)]. A medida que a constante de acoplamento aumenta, a corrente evolui de uma estrutura de picos para uma estrutura de antiressonâncias (curva preta-sólida) para $\Lambda = 0.5$. Finalmente, apresenta uma forma de dente-de-serra para $\Lambda = 1$ refletindo uma forte redução da influência do caráter discreto do espectro do PQ sobre a corrente. A inversão das ressonâncias em antiressonâncias é uma assinatura do efeito Fano, demonstrando que os processos de interferência entre diferentes caminhos tomados pelos elétrons permanece para o caso fora do equilíbrio. Na Fig. 18(b), é mostrada a variação da corrente para diferentes valores da constante de fase ϕ . É possível notar que o padrão de antiressonâncias para $\phi = 0$ (curva preta-sólida)

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 curva. 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.



Fonte: Elaboração do próprio autor.

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.



Fonte: Elaboração do próprio autor.

é completamente alterado pela variação da fase. Em particular, para $\phi = 0.6\pi$ a corrente não apresenta nenhum traço do caráter discreto do PQ (curva verde-tracejada) e na curva há uma variação contínua com o potencial de gate. A medida que a fase aumenta além de $\phi = 0.6\pi$, o caráter ressonante é novamente recuperado e é possível observar novamente as antiressonâncias na curva da corrente elétrica. Isto pode ser observado na curva para $\phi = 0.80\pi$ (curva azul-pontilhada) onde as antiressonâncias correspondem às da curva para $\phi = 0$.

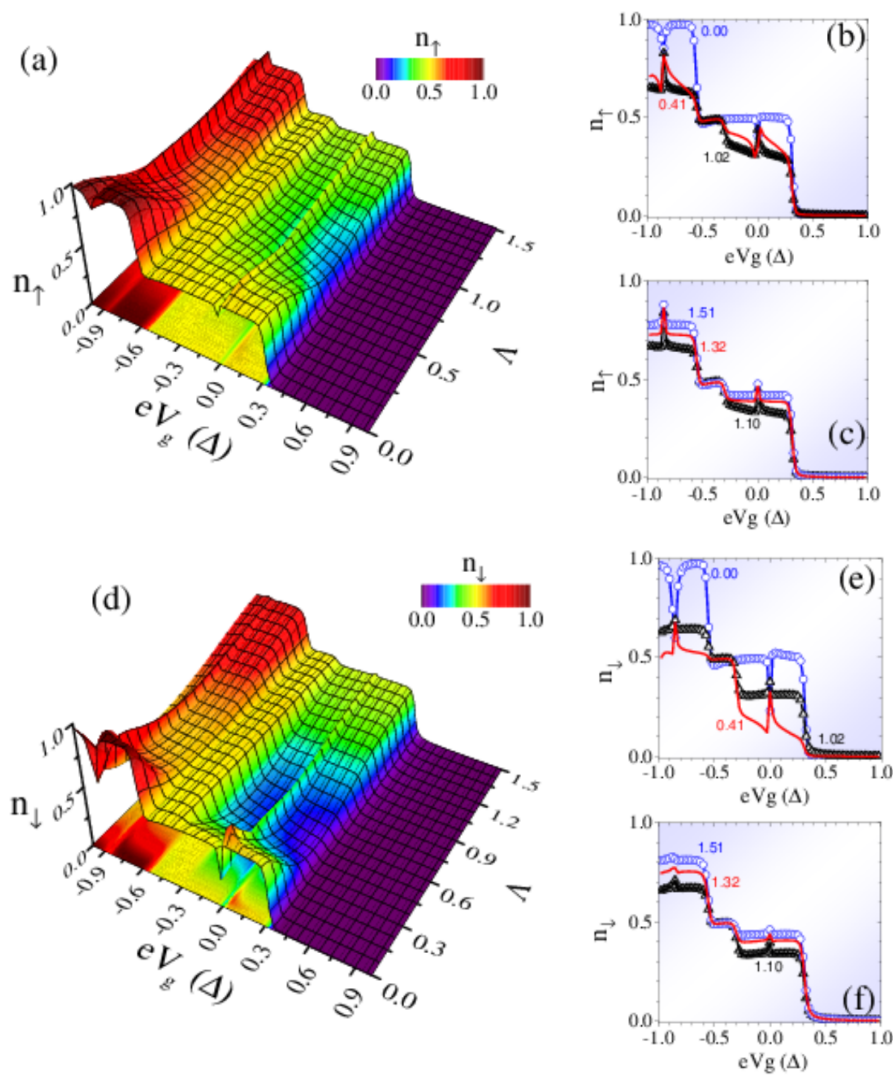
3.2.2.2 Ocupação no PQ

A última propriedade de não-equilíbrio considerada neste trabalho é a ocupação do PQ que foi estudada para o sistema sem acoplamento direto na seção anterior. Foi demonstrado que é possível “escrever” um spin no PQ por meio da aplicação de um potencial de bias ao ferromagneto quando este apresenta uma polarização $P \neq 0$. Aqui será considerado como a ocupação é modificada quando os parâmetros Λ e ϕ são diferentes de zero. Na Fig. 19 são apresentadas as ocupações para spin up [Fig. 19(a)] e spin down [Fig. 19(d)] em função do potencial de gate e da constante de acoplamento Λ . Para estas curvas a constante de fase $\phi = 0$. Para ambas as ocupações a estrutura geral observada para o sistema sem acoplamento direto é mantida, i.e., a superfície apresenta três platôs correspondendo a uma ocupação nula para $eV_g > 0.3$, ocupação unitária para $-0.6 < eV_g < 0.3$ e ocupação dupla para $eV_g < -0.6$. Esta estrutura está relacionada à correlação Coulombiana no PQ conforme previamente discutido. O efeito de Λ não altera a estrutura geral da superfície de ocupação mas introduz mudanças sobre

as ressonâncias e antiressonâncias que são superpostas à estas superfícies. Isto pode ser melhor observado nas Figs. 19(b) e 19(c) para $\langle \hat{n}_\uparrow \rangle$ e nas Figs. 19(e) e 19(f) para $\langle \hat{n}_\downarrow \rangle$. Em particular, as curvas da Fig. 19(c) apresentam as ressonâncias de Andreev previamente identificadas para $\Lambda = 0$ (curva azul) e para $\Lambda = 0.41$ e 1.02 as ressonâncias apresentam uma variação intermediária entre ressonância e antiressonância, curvas vermelha e preta, respectivamente. Na Fig. 19(c), os perfis para $\Lambda > 1$ são apresentados e nota-se uma completa conversão de antiressonâncias em ressonâncias para $\Lambda = 1.51$ (curva azul). Para spin down, as antiressonâncias também são convertidas em ressonâncias conforme pode-se notar das Figs. 19(e) e 19(f). É importante notar que embora ocorram modificações nos perfis das ocupações, a diferença entre as ocupações ainda permanece resultando em um acúmulo do spin no interior do PQ. Desta forma, o efeito que permite a “escrita” de spin ainda permanece mesmo sob a influência do acoplamento direto entre os eletrodos.

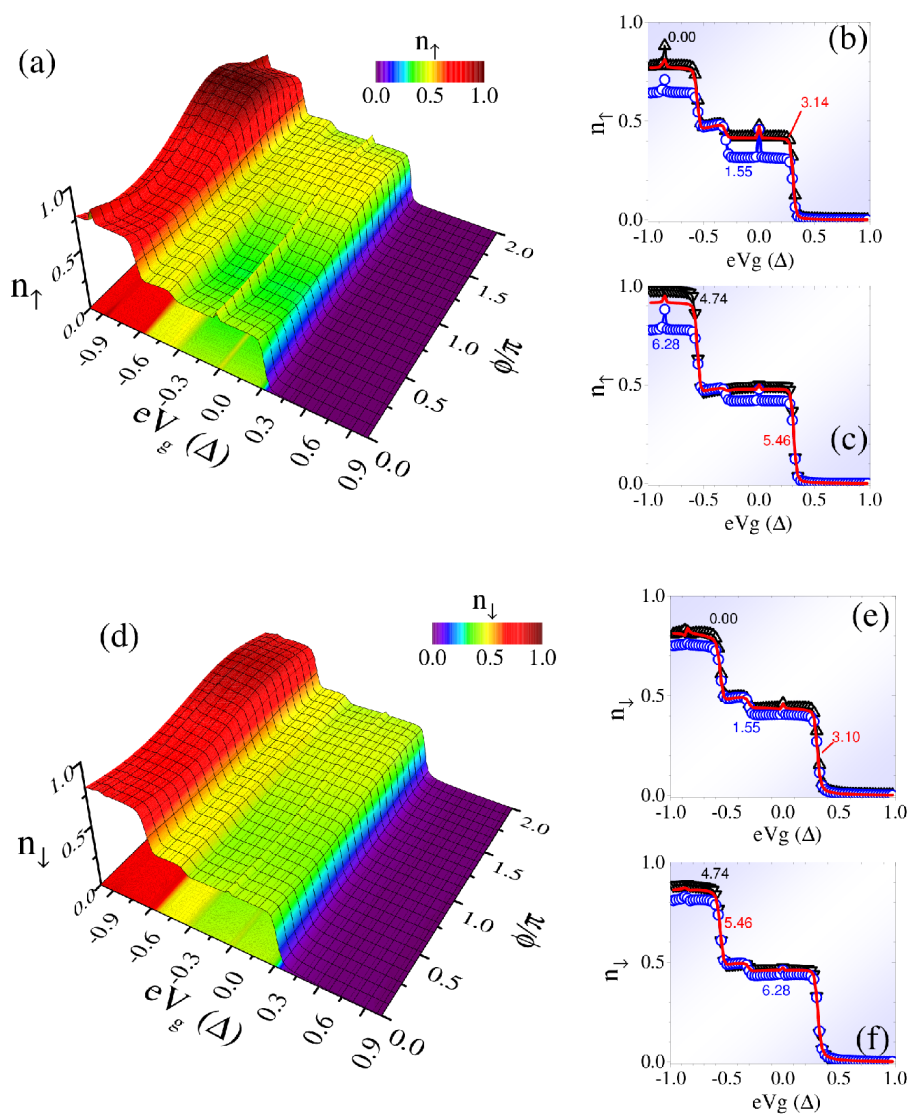
Na Fig. 20 são apresentadas as ocupações para spins up e down em função do potencial de gate e da constante de fase, ϕ . Desde que a variação da constante de fase altera o perfil das ressonâncias e antiressonâncias é possível suprimir completamente as ressonâncias para $\phi = 5.46$ rad eliminando assim o acúmulo de spin. Isso pode ser verificado diretamente observando os perfis das Figs. 20(c) e 20(f) onde as curvas vermelhas não apresentam nenhum traço de ressonância. A medida que a constante de fase se aproxima de 2π recupera-se, como esperado, o comportamento de $\phi = 0$.

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.



Fonte: Elaboração do próprio autor.

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.



Fonte: Elaboração do próprio autor.

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).