Universidade Estadual de Campinas Instituto de Física "Gleb Wataghin"

Transporte por reflexão de Andreev em pontos quânticos duplos acoplados a eletrodos supercondutores e ferromagnéticos

Tese de Doutorado

EZEQUIEL COSTA SIQUEIRA

Orientador: Prof. Dr. Guillermo Gerardo Cabrera Oyarzún

Este exemplar corresponde a redação final da tese defendida e aprovada pela comissão julgadora em 07/04/2010.

Campinas, 18 de abril de 2010

uillermo Cabrera

Prof. Dr. Guillermo Gerardo Cabrera Oyarzún

Tese de Doutorado apresentada ao Instituto de Física "Gleb Wataghin", da Universidade Estadual de Campinas, como requisito parcial para a obtenção do título de Doutor em Ciências.

Banca Examinadora: Prof. Dr. Guillermo Gerardo Cabrera Oyarzún (DFMC/IFGW/UNICAMP) Prof. Dr. César Augusto Dartora (Eng. Elétrica/UFPR) Prof. Dr. Pascoal José Giglio Pagliuso (DEQ/IFGW/UNICAMP) Prof. Dr. Bernardo Laks (DFA/IFGW/UNICAMP) Prof. Dr. Cláudio Antônio Cardoso (DF/UFSCar)

Campinas, 18 de abril de 2010.

FICHA CATALOGRÁFICA ELABORADA PELA **BIBLIOTECA DO IFGW - UNICAMP**

Si75t	Siqueira, Ezequiel Costa Transporte por reflexão de Andreev em pontos quânticos duplos acoplados a eletrodos supercondutores e ferromagnéticos / Ezequiel Costa Siqueira Campinas, SP : [s.n.], 2010.
	Orientador: Guillermo Gerardo Cabrera Oyarzún. Tese (doutorado) - Universidade Estadual de Campinas, Instituto de Física "Gleb Wataghin".
	 Reflexão de Andreev. Transporte quântico. Ferromagnetismo. Supercondutividade. Pontos quânticos. Nanoestrutura. Spintrônica. Cabrera Oyarzún, Guillermo Gerardo. Universidade Estadual de Campinas. Instituto de Física "Gleb Wataghin".
	(vsv/ifgw)
- Títu ferm - Pal 1. 2. 3. 4. 5. 6. 7.	Ilo em inglês: Andreev transport in double quantum dots coupled to superconductor and omagnetic leads avras-chave em inglês (Keywords): Andreev reflection Quantum transport Ferromagnetism Superconductivity Quantum dots Nanostructure Spintronics
- Áre	a de Concentração: Física da Matéria Condensada
- Titu	Ilação: Doutor em Ciências
- Bar Pro Pro Pro Pro	nca Examinadora: f. Guillermo Gerardo Cabrera Oyarzún f. Bernardo Laks f. Pascoal José Giglio Pagliuso f. César Augusto Dartora

- Prof. Cesar Augusto Dartora Prof. Claudio Antonio Cardoso
 Data da Defesa: 07-04-2010
 Programa de Pós-Graduação em: Física



Secretaria de Pós-Graduação - Tel: (19) 3521-5305 FAX: (19) 3521-4142 MEMBROS DA COMISSÃO JULGADORA DA TESE DE DOUTORADO DE **EZEQUIEL COSTA SIQUEIRA - RA 029467,** APRESENTADA E APROVADA AO INSTITUTO DE FÍSICA "GLEB WATAGHIN" DA UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS, EM 07/04/2010.

COMISSÃO JULGADORA:

ormo Cabera

Prof. Dr. Guillermo Gerardo Cabrera Oyarzún – DFMC/IFGW/UNICAMP (Orientador do Candidato)

Bernardo Laks

Prof. Dr. Bernardo Laks – DFA/IFGW/UNICAMP

Prof. Dr. Pascoal José Giglio Pagliuso - DEQ/IFGW/UNICAMP

Mario

Prof. Dr. Claudio Antonio Cardoso - DF/UFSCAR

Prof. Dr. César Augusto Darrora – Departamento de Engenharia Elétrica/UFPR

iv

 \grave{A} minha querida esposa, Márcia

Agradecimentos

Ao Prof. Dr. Guillermo G. Cabrera Oyarzún, por ter cumprido seu papel de orientador, pelo seu apoio ao longo destes quatro anos e pela liberdade dada durante a realização deste trabalho.

À minha querida esposa, Márcia Maechake C. Siqueira, por todo carinho, compreensão e apoio nos momentos complicados que passamos juntos neste tempo.

 $\grave{\mathbf{A}}$ CPG e à secretaria do DFMC pelo apoi
o técnico/administrativo.

Ao CNPq pelo financiamento deste trabalho de doutoramento.

Abstract

In this work we studied the quantum transport in two hybrid nanostructures composed of double quantum dots (DQD) s coupled to superconductor (S) and ferromagnetic (F) leads. The first nanostructure, denoted by $F - QD_a - QD_b - S$, is composed of a ferromagnet, two quantum dots, and a superconductor connected in series. In the second nanostructure, denoted by $(F_1, F_2) - QD_a - QD_b - S$, a second ferromagnetic lead is added and coupled to the first QD. By using the non-equilibrium Green's function approach, we have calculated the electric current, the differential conductance and the transmittance for energies within the superconductor gap. In this regime, the mechanism of charge transmission is the Andreev reflection, which allows for a control of the current through the ferromagnet polarization. We have also included interdot and intradot interactions, and have analyzed their influence through a mean field approximation. For the $F - QD_a - QD_b - S$ system the presence of interactions tend to localize the electrons at the double-dot system, leading to an asymmetric pattern for the density of states at the dots, and thus reducing the transmission probability through the device. In particular, for non-zero polarization, the intradot interaction splits the spin degeneracy, reducing the maximum value of the current due to different spin-up and spin-down densities of states. Negative differential conductance (NDC) appears for some regions of the voltage bias, as a result of the interplay of the Andreev scattering with electronic correlations. By applying a gate voltage at the dots, one can tune the effect, changing the voltage region where this novel phenomenon appears. In the $(F_1, F_2) - QD_a - QD_b - S$, we have found that the signal of the magnetoresistance can be changed through the external potential applied in the ferromagnets. In addition, it is possible to control the current of the first ferromagnet (F_1) through the potential applied in the second one (F_2) . This transistor-like behavior can be useful in technological applications. In the presence of interaction at the dots it was observed the NDC effect even when the electrodes were fully polarized. The results presented in this thesis show that the interplay between the superconductor correlation and electronic interactions can give rise to original effects which can be used in future technological applications.

x_____

Resumo

Neste trabalho é estudado o transporte quântico em nanoestruturas híbridas compostas por pontos quânticos (PQ) duplos acoplados a eletrodos supercondutores (S) e ferromagnéticos (F). A primeira nanoestrutura, denotada por $F - PQ_a - PQ_b - S$ consiste em dois PQ_s em série acoplados a um eletrodo ferromagnético e outro supercondutor. O segundo sistema, denotado por $(F_1, F_2) - PQ_a - PQ_b - S$ consiste em dois PQ_s em série acoplados a dois eletrodos ferromagnéticos e um supercondutor. Através do método de funções de Green de não equilíbrio foram obtidas expressões para a corrente elétrica, condutância diferencial, densidade local de estados (LDOS) e a transmitância para energias inferiores ao gap supercondutor. Neste regime, o mecanismo de transmissão de carga é a reflexão de Andreev, a qual permite controlar a corrente através da polarização do ferromagneto. A presença de interações nos PQs é considerada usando um tratamento de campo médio. Para o sistema $F - PQ_a - PQ_b - S$, as interações tendem a localizar os elétrons nos PQs levando a um padrão assimétrico da LDOS reduzindo a transmissão através da nanoestrutura. Em particular, a interação intra PQ levanta a degenerescência de spin reduzindo o valor máximo da corrente devido ao desequilíbrio nas populações de spin up e spin down. Regiões de condutância diferencial negativa (CDN) aparecem em determinados valores do potencial aplicado, como resultado da competição entre o espalhamento Andreev e as correlações eletrônicas. Aplicando-se um potencial de gate nos pontos quânticos é possível sintonizar o efeito mudando a região onde este fenômeno ocorre. Para o sistema $(F_1, F_2) - PQ_a - PQ_b - S$ observou-se que o sinal da magnetoresistência pode mudar de positivo para negativo mudando-se o sinal do potencial aplicado. Além disso é possível controlar a corrente no primeiro eletrodo mudando-se o valor do potencial no segundo ferromagneto. Este tipo de controle pode ser interessante do ponto de vista de aplicações desde que é um comportamento similar a um transistor. Na presença de interações nos PQs, observou-se novamente regiões de CDN para determinados valores do potencial aplicado mesmo para quando os ferromagnetos estão completamente polarizados. Desta forma, a interação entre supercondutividade e correlações eletrônicas permitiu observar fenômenos originais mostrando que este sistemas podem ser utilizados em aplicações tecnológicas futuras.

Sumário

1	Inti	rodução	1
Ι	TE	ORIA	9
2	For	malismo de Keldysh	11
	2.1	O contorno de ordenamento temporal	11
	2.2	Funções de Green de não-equilíbrio (FGNE)	14
		2.2.1 Versão de Interação	16
	2.3	Continuação Analítica	18
	2.4	A equação de Keldysh	22
	2.5	Formalismo de Keldysh para nanoestruturas híbridas	24
3	Apl	icação do formalismo de Keldysh ao sistema $(F_1, F_2) - PQ_a - PQ_b - S$	27
	3.1	Modelo e Formulação	27
		3.1.1 Hamiltonianos supercondutor e ferromagnético	27
		3.1.2 Hamiltoniano do ponto quântico duplo	30
		3.1.3 Hamiltoniano de tunelamento	31
	3.2	Funções de Green dos pontos quânticos	32
		3.2.1 Cálculo das funções de Green $\mathbf{G}_{aa}^{r/a}$ e $\mathbf{G}_{bb}^{r/a}$	32
		3.2.2 Cálculo da função de Green $\mathbf{G}_{aa}^{<}$	38
	3.3	Cálculo das quantidades físicas	44
		3.3.1 Cálculo da corrente elétrica	44
		3.3.2 Cálculo da ocupação nos pontos quânticos	51
		3.3.3 Cálculo da densidade local de estados (LDOS)	52
	3.4	Procedimento numérico	53

II RESULTADOS

5	7
U	•

4	Res	sultados para o sistema $F_1 - PQ_a - PQ_b - S$	59				
	4.1	Resultados para o caso não-interagente	60				
		4.1.1 Condutância em zero bias	61				
		4.1.2 Transporte com voltagem (bias) finita	63				
	4.2	Resultados para o caso interagente	73				
		4.2.1 Efeitos da interação inter pontos quânticos (\mathcal{K})	73				
		4.2.2 Efeitos da interação intra-pontos quânticos	78				
		4.2.3 Resultados para $\mathcal{U} \neq 0$ e $\mathcal{K} \neq 0$	79				
5	Res	sultados para o sistema $(F_1, F_2) - PQ_a - PQ_b - S$	83				
	5.1	Resultados para o caso não-interagente	83				
		5.1.1 Condutância em zero bias	83				
		5.1.2 Resultados para bias finita	86				
	5.2	Resultados para o caso interagente	94				
6	Con	nclusões	99				
	6.1	O sistema $F - QD_a - QD_b - S$	99				
	6.2	O sistema $(F_1, F_2) - QD_a - QD_b - S$					
	6.3	Conclusão geral	101				
II	ΙA	APÊNDICES 1	03				
\mathbf{A}	Den	nonstração das equações do capítulo 2 1	05				
	A.1	Demonstração da equação (2.2.10) $\ldots \ldots \ldots$	105				
		A.1.1 Representação de Interação	105				
		A.1.2 Função de Green ordenada no contorno na versão de interação	107				
в	Cál	culo das auto-energias e funções de Green dos eletrodos isolados 1	11				
	B.1	Função de Green e auto-energia do supercondutor	111				
	B.2	2 Função de Green e auto-energia do eletrodo ferromagnético $\ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots 118$					
	B.3	Teorema de flutuação-dissipação	124				

	B.4	Cálculo	das auto-energias $\Sigma^<$	125
		B.4.1 I	Eletrodo supercondutor	125
		B.4.2 I	Eletrodos ferromagnéticos	126
\mathbf{C}	Rela	ações A	uxiliares	129
	C.1	Cálculo	da transformada de Fourier de $\vartheta(T)(\cos E_k T + A \sin E_k T)$	129
	C.2	Cálculo	da transformada de Fourier de $\vartheta(-T)(\cos E_kT + A \sin E_kT)$	130
	C.3	Cálculo	da transformada de Fourier de $\vartheta(T)B \operatorname{sen} E_kT$	132
	C.4	Cálculo	da transformada de Fourier de $\vartheta(-T)B \operatorname{sen} E_kT$	132
	C.5	Análise	da integral $\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\epsilon_k}{(\omega + E_k \pm i\eta)(\omega - E_k \pm i\eta)} \cdots \cdots \cdots \cdots \cdots \cdots \cdots \cdots \cdots$	133
		C.5.1 (Cálculo de $\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\epsilon_k}{(\omega + E_k \pm i\eta)(\omega - E_k \pm i\eta)}$ para $\omega > \Delta$	133
		C.5.2 (Cálculo de $\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\epsilon_k}{(\omega + E_k + in)(\omega - E_k + in)}$ para $\omega < \Delta$	135
		C.5.3 I	Integral das identidades $\dots \dots \dots$	136
D	Cálo	culo da	função de Green $\mathbf{G}^{<}_{lphaeta}(\omega)$	137
D	Cál o D.1	culo da Cálculo	função de Green $\mathbf{G}_{\alpha\beta}^{<}(\omega)$ de $\mathbf{G}_{\alpha\beta}^{<}$	137 137
D	Cálo D.1	culo da Cálculo D.1.1 (função de Green $\mathbf{G}_{\alpha\beta}^{<}(\omega)$ de $\mathbf{G}_{\alpha\beta}^{<}$	137 137 139
D	Cálo D.1 Cálo	culo da Cálculo D.1.1 (culo da	função de Green $\mathbf{G}_{\alpha\beta}^{<}(\omega)$ de $\mathbf{G}_{\alpha\beta}^{<}$	 137 137 139 141
D	Cálo D.1 Cálo E.1	culo da Cálculo D.1.1 (culo da Correnta	função de Green $\mathbf{G}_{\alpha\beta}^{<}(\omega)$ de $\mathbf{G}_{\alpha\beta}^{<}$	 137 137 139 141 141
D	Cálo D.1 Cálo E.1 E.2	culo da Cálculo D.1.1 (culo da Corrent Corrent	função de Green $\mathbf{G}_{\alpha\beta}^{<}(\omega)$ de $\mathbf{G}_{\alpha\beta}^{<}$	 137 137 139 141 141 152
D	Cálo D.1 Cálo E.1 E.2	culo da Cálculo D.1.1 (culo da Corrent Corrent	função de Green $\mathbf{G}_{\alpha\beta}^{<}(\omega)$ de $\mathbf{G}_{\alpha\beta}^{<}$	 137 137 139 141 141 152
D E IV	Cálo D.1 Cálo E.1 E.2 A	culo da Cálculo D.1.1 (culo da Correnta Correnta	função de Green $G_{\alpha\beta}^{<}(\omega)$ de $G_{\alpha\beta}^{<}$ Continuação Analítica da equação (D.1.3) corrente elétrica e I_1 e I_2 OS	 137 137 139 141 141 152 163
D E IV F	Cálo D.1 Cálo E.1 E.2 A Phy	culo da Cálculo D.1.1 (culo da Corrent Corrent RTIGC s. Rev.	função de Green $\mathbf{G}_{\alpha\beta}^{<}(\omega)$ de $\mathbf{G}_{\alpha\beta}^{<}$ Continuação Analítica da equação (D.1.3) corrente elétrica e I_1 e I_2 OS B 81, 094526 (2010)	 137 137 139 141 141 152 163 165
D E IV F G	Cálo D.1 Cálo E.1 E.2 A Phy ArX	culo da Cálculo D.1.1 (culo da Correnta Correnta RTIGO s. Rev. Giv: 100	função de Green $G_{\alpha\beta}^{<}(\omega)$ de $G_{\alpha\beta}^{<}$ Continuação Analítica da equação (D.1.3) corrente elétrica e I_1 e I_2 OS B 81, 094526 (2010) 3.3688v1(2010)	 137 137 139 141 141 152 163 165 177

Introdução

O interesse em propriedades de transporte de sistemas mesoscópicos tem aumentado recentemente devido ao potencial destes sistemas em aplicações tecnológicas. Recentes progressos na produção de nanoestruturas de alta qualidade permitem analisar efeitos baseados nas propriedades de spin do elétron (spintrônica) e fenômenos puramente quânticos [1, 2]. Com efeito, na escala de micro e nanômetros o tamanho do sistema é menor do que o comprimento de coerência em fase e os elétrons retém suas fases à medida que percorrem a nanoestrutura. No limite balístico, i.e., quando as dimensões da amostra são menores do que o livre caminho médio os elétrons atravessam a amostra sem sofrer espalhamentos. Em contraste com sistemas macroscópicos, a condutância de sistemas mesoscópicos é específica da amostra desde que as funções de onda são fortemente dependentes da forma das fronteiras da amostra e da configuração dos centros de espalhamento dentro da amostra. Neste contexto, tem havido um renovado interesse em nanoestruturas baseadas em combinações de metais normais (N) com metais supercondutores (S). A física de interfaces NStem sido extensivamente estudada por muitos anos [3–6]. No entanto, a possibilidade de construir sistemas na escala de micro e nanômetros permite a observação de efeitos originais nestes sistemas.

Quando os metais supercondutor e normal estão em contato, os pares de Cooper do supercondutor situados na vizinhança da interface difundem para o interior do metal normal. Com isso o metal normal adquire propriedades supercondutoras. Este efeito, chamado de efeito de proximidade [4], foi observado experimentalmente pela primeira vez por Meissner em 1960 em fios supercondutores cobertos com metais normais [7]. Um ingrediente crucial para entender o efeito de proximidade foi proposto por Andreev¹ em 1964 [9]. De acordo com Andreev, um elétron do metal normal, com

¹Este mecanismo também foi proposto de maneira independente e no mesmo ano por Saint-James [8]. No entanto, a nomenclatura consagrada na literatura menciona somente Andreev. Por uniformidade, o padrão usado na literatura será seguido nesta tese.

uma energia ε acima do nível de Fermi e spin up incidindo em uma interface com o supercondutor, se combina com um segundo elétron, de energia $-\varepsilon$ sob o nível de Fermi e spin down, para formar um par de Cooper que se propaga dentro do supercondutor. O segundo elétron que é removido do mar de Fermi deixa um buraco se propagando no sentido contrário ao elétron incidente. Este processo é hoje chamado *reflexão de Andreev* e consiste portanto na reflexão de um elétron incidente como um buraco [10, 11]. A figura 1.1 mostra uma segunda característica notável da reflexão de Andreev. No caso de uma interface normal/isolante (NI) um elétron incidente seria refletido de modo que somente a componente do momento normal à interface fosse invertida. No caso da reflexão de Andreev, a situação é completamente diferente desde que o buraco refletido apresenta todas as componentes do momento invertidas de modo que este retraça o mesmo caminho feito pelo elétron incidente. Isso ocorre devido ao elétron e o buraco formarem um par coerente em fase. Em geral, devido a processos de espalhamentos no metal normal, o buraco perde a coerência em fase a uma certa distância da interface e os caminhos do elétron e o do buraco começam a divergir. Uma medida desta divergência é o comprimento de coerência do metal normal que é dado por $\xi_N = \hbar v_F/k_BT$ no caso em que o metal é livre de impurezas [12].

Os recentes avanços experimentais permitiram a produção de amostras na escala de nanômetros



Figura 1.1: Comparação das reflexões de um elétron por um isolante (I) e um metal supercondutor (S). O elétron de um metal normal incide na interface com o isolante e sofre uma reflexão especular. No caso do supercondutor dois aspectos são diferentes: primeiro o elétron é refletido como um buraco e, em segundo o buraco refletido segue a mesma trajetória do elétron incidente mas em sentido contrário [13].

3

viabilizando a análise do processo de reflexão de Andreev em diversos sistemas. Com efeito, uma vasta gama de junções tem sido estudadas tanto teórica quanto experimentalmente [14]. Em particular, junções Josephson S/I/S e S/N/S tem sido estudadas para analisar os efeitos dos estados ligados de Andreev sobre as propriedades de transporte [15,16], efeitos da quantização da supercorrente de contatos quânticos pontuais [17–20] e ainda a chamada anomalia em "zero-bias" de junções S/I/N [21–23] são objetos de investigações recentes. O tunelamento ressonante de elétrons através de um ponto quântico, supercondutor (SPQ) ou normal (PQ), conectado a eletrodos normais e supercondutores é outro assunto intensamente investigado, incluindo uma grande variedade de estruturas híbridas tais como S - SPQ - S, N - SPQ - N, $S - PQ - S \in N - SPQ - S$. Nos sistemas S-SPQ-SeN-SPQ-Nonde oSPQapresenta gap de energia maior do que a energia potencial Coulombiana, pode ser observada uma oscilação na corrente de tunelamento com periodicidade dada pelo dobro da carga do elétron [24–30]. Ralph, Black e Tinkham [31] determinaram a densidade de estados do sistema S - PQ - S a partir das curvas de corrente vs. potencial aplicado. Um sistema similar foi investigado teoricamente por Yeyati et al. [32] no regime de acoplamento fraco entre o PQ e os eletrodos. O efeito Kondo também foi investigado em sistemas N - PQ - S e observou-se que a anomalia Kondo é aumentada na presença de um eletrodo supercondutor [33,34]. Estes são alguns exemplos dentre inúmeros trabalhos que vem sendo desenvolvidos em sistemas híbridos normais/supercondutores.

No processo de reflexão de Andreev, o buraco refletido apresenta spin contrário ao do elétron incidente. Esta é uma condição necessária para o processo ocorra, desde que os pares de Cooper são singletos. Conforme ilustra a figura 1.2a, um elétron de spin up incide na interface com o supercondutor e o buraco refletido ocupa um dos estados da banda de spin down do metal normal. No caso em que o metal normal é trocado por um metal ferromagnético, a situação muda desde que neste caso existe um desequilíbrio entre as populações de elétron de spin up e spin down. No caso extremo em que a polarização do ferromagneto é igual unidade, então somente existe um tipo de spin no nível de Fermi. Neste caso, a junção ferromagnética/supercondutora (FS) apresenta condutância nula desde que o processo é proibido. Conforme ilustrado na figura 1.2b, o ferromagneto apresenta polarização igual a 1 de modo que somente há elétrons de spin up no nível de Fermi. Como resultado, não há estados disponíveis na banda de spin down para o buraco refletido ocupar, o que inviabiliza o processo. Com isso, a diferença fundamental entre junções $NS \in FS$ é a dependência da condutância com a polarização do ferromagneto. O primeiro tratamento quantitativo para junções FS foi dado



Figura 1.2: Diagrama de bandas do metal ferromagnético e do supercondutor que compõem a junção F/S. (a) metal F com polarização nula. Neste caso o elétron com spin up é refletido como um buraco de spin down que ocupa um estado na banda de spin down no ferromagneto. (b) ferromagneto completamente polarizado. Neste caso a reflexão de Andreev é proibida desde que não há estados na banda de spin down para o buraco refletido ocupar [35].

de Jong & Beenakker [36], que aplicaram o formalismo de Landauer para determinar a condutância da junção (G_{FS}). Definindo G_{FN} como a condutância da junção quando o supercondutor está no estado normal, então G_{FS} é dada por,

$$G_{FS} = 2G_{FN}(1-P) \tag{1.0.1}$$

onde P é a polarização do ferromagneto.

A equação 1.0.1 é o resultado central da referência [36] e mostra que para P = 0, $G_{FS} = 2G_{FN}$. Isso ocorre devido ao fato de dois elétrons estarem sendo transferidos de uma só vez na interface. À medida que a polarização aumenta, a condutância é reduzida de modo que $G_{FS} = 0$ quando P = 1. A relação entre G_{FS} e P foi usada por Soulen *et al.* para determinar a polarização do ferromagneto a partir das medidas de condutância da junção [35].



Figura 1.3: (a) Diagrama esquemático de uma nanoestrutura com três terminais para detectar a reflexão de Andreev cruzada. Os elétrons de F_1 são injetados no supercondutor e sofrem RAC no segundo eletrodo. O fluxo de buracos dá origem a uma diferença de potencial que pode ser medida no segundo eletrodo. (b) Microscopia eletrônica de uma amostra usada por Beckmann et al. [37] para detectar a RAC.

O spin do elétron exerce um papel central nas propriedades de sistemas S/F [38,39]. Outro efeito interessante envolvendo junções FS foi proposto por Deutscher & Feinberg [40]. A corrente elétrica de dois eletrodos ferromagnéticos conectados a um eletrodo supercondutor depende fortemente da orientação relativa da magnetização destes eletrodos, veja figura 1.3a. Assumindo que os dois eletrodos estão completamente polarizados, então o elétron vindo de um eletrodo não pode experimentar reflexão de Andreev no mesmo eletrodo. Entretanto, esta reflexão é possível no outro eletrodo dado que sua polarização seja oposta, e a distância entre os eletrodos seja menor do que o comprimento de coerência supercondutor ξ . Este processo não-local é chamado de *reflexão de* Andreev cruzada (RAC). A magnetoresistência do sistema será elevada para orientação paralela das magnetizações e baixa para o caso antiparalelo. Na figura 1.3, o eletrodo F_1 é submetido à uma diferença de potencial de modo que elétrons de spin up são injetados no supercondutor. Como conseqüência, existe um fluxo de buracos no segundo eletrodo dando origem a um potencial positivo que pode ser medido em relação ao potencial químico do supercondutor, o qual é mantido aterrado. Este método foi utilizado por Beckmann et al. [37] para detectar a reflexão de Andreev cruzada na amostra apresentada na imagem de microscopia da figura 1.3b. A amostra é obtida depositando-se três fios de ferro sobre um substrato de silício. Em seguida uma barra de alumínio é depositada na direção horizontal tocando nos fios de ferro. Uma corrente é então injetada em um dos fios enquanto é medido o potencial elétrico no outro. O terceiro fio pode ser usado para verificar o efeito da distância dos eletrodos sobre a RAC, desde que a correlação se estende por uma distância dada por ξ . Outros trabalhos também verificaram a RAC [41–44], de modo que este fenômeno está bem estabelecido na literatura. Após a proposição deste efeito, tem-se observado uma profusão de trabalhos no sentido de verificar o efeito em outras geometrias [45-51], em estruturas ressonantes contendo pontos quânticos [52–57], em diferentes regimes de condução (difusivo e balístico) [58,59] e ainda explorando questões mais fundamentais como, por exemplo, o emaranhamento entre as quasipartículas nos diferentes eletrodos [60–65].

Dentro da vasta gama de combinações de PQs com eletrodos ferromagnéticos e supercondutores, sistemas compostos por PQs duplos são muitos promissores, desde que estes podem servir como modelo para moléculas diatômicas [66]. No caso de PQs fracamente acoplados, os elétrons estão bem localizados dentro de cada PQ, suas funções de onda estão espacialmente separadas e o transporte eletrônico é descrito por um tunelamento seqüencial entre os estados discretos de cada PQ. Com o aumento do acoplamento inter PQs as funções de onda hibridizam dando origem a estados moleculares estendendo-se nos dois PQs. A possibilidade de sintonizar ambos o acoplamento e os níveis de energia de cada PQ torna o sistema baseado em PQs duplos um protótipo interessante para estudar os efeitos de interações eletrônicas em nanoestruturas. Muitos trabalhos envolvendo sistemas com pontos quânticos duplos (PQDs) tem sido desenvolvidos principalmente estudando o efeito Kondo [67–69], espalhamento com inversão de spin [70], efeitos de diferentes geometrias (associando os PQs em série ou em paralelo) [71,72] e ainda sistemas envolvendo supercondutores. Neste último caso, há estudos envolvendo junções Josephson [73–75] e sistemas N - PQD - S onde o transporte ocorre por reflexão de Andreev [76,77]. No entanto, até o início deste trabalho de tese ainda não havia registros de trabalhos explorando a RAC em PQDs.

As nanoestruturas formadas pela combinação de PQDs e eletrodos FS podem permitir a observação de efeitos originais. Por esta razão, neste trabalho de doutoramento o sistema composto por dois ferromagnetos e um supercondutor acoplados a dois PQs é estudada. Conforme mostrado na figura 1.4, os PQs estão associados em série e os dois ferromagnetos estão acoplados ao primeiro PQ. Os potenciais químicos de $F_1 \in F_2$ são determinados pelos potenciais $V_1 \in V_2$. O supercondutor, acoplado ao segundo PQ é mantido aterrado, de modo que a corrente que entra no supercondutor é dada pela soma das correntes provenientes de cada eletrodo ferromagnético. Estas correntes se combinam de modo que a corrente que passa pelo supercondutor seja despolarizada. Isso ocorre via processo de RAC entre os eletrodos $F_1 \in F_2$. Será considerada a presença de interações nos pontos quânticos e o nível de energia de cada PQ pode ser deslocado em relação ao zero através de potenciais de gate $V_{ga} \in V_{gb}$. O sistema será tratado usando-se o método de funções de Green de não-equilíbrio (FGNE), também chamado formalismo de Keldysh [78–85]. Este método tem se revelado extremamente útil para estudar problemas de transporte em sistemas de muitos corpos e



Figura 1.4: Diagrama esquemático do sistema estudado neste trabalho de tese. A nanoestrutura é composta por dois pontos quânticos em série, denominados a e b, conectados a eletrodos ferromagnéticos e supercondutores. Ao ponto quântico a estão ligados dois eletrodos ferromagnéticos F_1 e F_2 , submetidos a potenciais V_1 e V_2 , respectivamente. O eletrodo supercondutor é conectado ao ponto quântico b e o mesmo é mantido aterrado. A corrente que entra no supercondutor é oriunda da soma das correntes de cada eletrodo ferromagnético.

sistemas mesoscópicos.

A tese está organizada da seguinte forma:

- No capítulo 2 o método de Keldysh será desenvolvido de maneira formal, onde as funções de Green e as propriedades básicas do formalismo serão apresentadas;
- No capítulo 3, o formalismo desenvolvido no capítulo 2 será aplicado na determinação das

propriedades de transporte do sistema apresentado na figura 1.4;

- No capítulo 4 são apresentados os resultados para o sistema F PQa PQb S o qual é uma particularização do sistema completo através do desacoplamento do segundo eletrodo ferromagnético;
- No capítulo 5 são apresentados os resultados para o sistema completo, i.e., o sistema $(F_1, F_2) PQa PQb S;$
- No capítulo 6 são apresentadas as conclusões finais.
- O trabalho ainda conta com cinco apêndices onde os cálculos dos capítulos 2 e 3 são detalhados.

Parte I

TEORIA

Formalismo de Keldysh

Neste capítulo será dada uma introdução ao formalismo de Keldysh também chamado formalismo de funções de Green de não-equilíbrio. Esta técnica é uma ferramenta extremamente útil para estudos de primeiros princípios de sistemas de muitas partículas fora do equilíbrio. Esta técnica é uma generalização do método de função de Green para sistemas em equilíbrio, o qual tem suas origens no desenvolvimento da teoria da eletrodinâmica quântica, no final da década de 40 e início da década de 50. A teoria de funções de Green fora do equilíbrio foi desenvolvida por Keldysh em 1965 [78] e, independentemente, por Kadanoff e Baym [79]. Embora as duas formulações sejam distintas, pode-se mostrar que estas são equivalentes.

O capítulo é estruturado da seguinte forma: primeiramente é definido o contorno de ordenamento temporal que é uma ferramenta que permite generalizar a teoria de funções de Green de equilíbrio para o caso fora do equilíbrio. A seguir, são definidas as funções de Green neste contorno de ordenamento temporal e as expressões para estas são desenvolvidas. Finalmente, a técnica de continuação analítica é apresentada e as equações básicas que serão utilizadas são apresentadas na última seção. No apêndice A são apresentadas alguns detalhes dos cálculos realizados neste capítulo.

2.1 O contorno de ordenamento temporal

O problema do transporte quântico pode ser situado dentro de uma classe geral de fenômenos descritos por um Hamiltoniano

$$\hat{H} = \hat{h} + \hat{H}'(t),$$
 (2.1.1)

em que o termo dependente do tempo $\hat{H}'(t)$ é responsável por tirar o sistema do equilíbrio podendo ser pela aplicação de um campo elétrico, acoplamento com algum reservatório de calor ou partículas, excitação por luz, etc. Em particular, neste trabalho $\hat{H}'(t)$ é responsável pelo surgimento de uma corrente elétrica no sistema. Será assumido que $\hat{H}'(t) \neq 0$ para $t > t_0$. Para tempos menores do que t_0 , o Hamiltoniano é dado pela parte independente do tempo $\hat{h} \equiv \hat{H}_0 + \hat{H}_i$, onde \hat{H}_0 é o Hamiltoniano de partículas livres e \hat{H}_i descreve a interação entre as partículas, ou seja, contém o aspecto de muitos corpos do problema.

Antes que a perturbação seja ligada, o sistema é descrito por uma matriz densidade de equilíbrio,

$$\varrho(\hat{h}) = \frac{\exp(-\beta \hat{h})}{\operatorname{Tr}[\exp(-\beta \hat{h})]},\tag{2.1.2}$$

onde $\beta = 1/k_B T$. A principal tarefa do formalismo de Keldysh é determinar o valor médio de um observável, para o qual é associado um operador quântico \hat{A} , após a interação ter sido "ligada". Para $t \ge t_0$,

$$\langle \hat{A}_H(t) \rangle = \text{Tr}[\varrho(\hat{h})\hat{A}_H(t)]$$
 (2.1.3)

onde o índice H indica que a dependência temporal é governada pelo Hamiltoniano completo.

É importante notar que cálculo de $\langle \hat{A}_H(t) \rangle$ está sendo realizado usando a matriz densidade de equilíbrio $\varrho(\hat{h})$. Conforme observado na referência [80], fisicamente, isto implica que os graus de liberdade termodinâmicos, contidos no Hamiltoniano de equilíbrio \hat{h} , não seguem de maneira instantânea as rápidas variações contidas em $\hat{H}'(t)$. Nos casos de interesse deste trabalho, esta aproximação é apropriada e não incorre a problemas desde que os casos que serão apresentados estão no regime estacionário. Nesta condição, as correlações iniciais não são relevantes para as propriedades de transporte.

Seguindo o método usado no caso de equilíbrio [80], o primeiro passo no cálculo da média (2.1.3) é passar o operador \hat{A}_H para a versão de interação, onde a dependência temporal é governada pelo Hamiltoniano independente do tempo, \hat{h} . Isto é feito aplicando-se a seguinte transformação:

$$\hat{A}_{H}(t) = \hat{v}_{h}^{\dagger}(t, t_{0})\hat{A}_{h}(t)\hat{v}_{h}(t, t_{0})$$
(2.1.4)

onde,

$$\hat{v}_h(t,t_0) = \mathcal{T}\left\{\exp\left[-i\int_{t_0}^t \hat{H}'_h(t')dt'\right]\right\}$$
(2.1.5)

onde \mathcal{T} é o operador de ordenamento temporal (ver apêndice A, pág. 106) e $\hat{H}'_h(t)$ está na versão de interação de H'(t):

$$\hat{H}'_h(t) = \exp\left[i\hat{h}(t-t_0)\right]\hat{H}'(t)\exp\left[-i\hat{h}(t-t_0)\right].$$

Na equação (2.1.5), a função exponencial deve ser interpretada como sua expansão em série de potências e, em cada termo, o operador de ordenamento temporal \mathcal{T} arranja os fatores $\hat{H}'_h(t)$ de modo que os operadores com argumentos menores de tempo são colocados à direita. Por exemplo, no caso de um produto de dois operadores tomados com tempos diferentes, $t \in t'$, tem-se que,

$$\mathcal{T}\left[\hat{H}'_{h}(t)\hat{H}'_{h}(t')\right] = \begin{cases} \hat{H}'_{h}(t)\hat{H}'_{h}(t'), & \text{se } t > t', \\ \hat{H}'_{h}(t')\hat{H}'_{h}(t), & \text{se } t' > t. \end{cases}$$
(2.1.6)

Similarmente, o operador $\hat{v}_h^{\dagger}(t, t_0) = \hat{v}_h(t_0, t)$ é dado por uma exponencial "anti-ordenada" definida por,

$$v_h^{\dagger}(t,t_0) = \tilde{\mathcal{T}}\left\{ \exp\left[+i \int_{t_0}^t \hat{H}_h'(t') dt' \right] \right\}$$
(2.1.7)

onde os operadores são arranjados na ordem inversa à definida por \mathcal{T} .

Usando-se as expressões formais (2.1.5) e (2.1.7) pode-se reescrever (2.1.4) explicitamente como,

$$A_H(t) = \tilde{\mathcal{T}} \left\{ \exp\left[-i \int_t^{t_0} \hat{H}'_h(t') dt'\right] \right\} A_h(t) \mathcal{T} \left\{ \exp\left[-i \int_{t_0}^t \hat{H}'_h(t') dt'\right] \right\}$$
(2.1.8)

tornando claro o significado físico da expressão acima: primeiro o sistema evolui com H'_h desde t_0 até o tempo t onde o operador $A_h(t)$ atua e após isso o sistema evolui de t para t_0 [81].

As duas integrais das funções exponenciais podem ser combinadas em uma única integral começando em t_0 , indo para t, e retornando para t_0 . No entanto, a ordem dos operadores deve ser preservada, i.e., a integral ordenada temporalmente de t_0 a t deve ser mantida à direita de $A_h(t)$ enquanto que a integral anti-ordenada deve permanecer à esquerda do operador $A_h(t)$. A ordem correta é preservada se $A_H(t)$ é definido por uma integração sobre um contorno "C" que começa no tempo t_0 , vai até t e retorna a t_0 de forma que os produtos sejam ordenados de acordo com suas posições ao longo do contorno: operadores cujos tempos que aparecem "mais tarde" no contorno devem ser colocados à esquerda dos operadores cujo tempo aparece antes no contorno. É importante observar que o tempo definido no contorno não segue necessariamente a ordem do tempo cronológico.

Definindo-se, o operador de ordenamento sobre o contorno C, como sendo \mathcal{T}_C , pode-se reescrever (2.1.8) na seguinte forma,

$$\hat{A}_H(t) = \mathcal{T}_C \left\{ \exp\left[-i \int_C \hat{H}'_h(t') dt' \right] \hat{A}_h(t) \right\}.$$
(2.1.9)

O contorno de ordenamento temporal é uma poderosa ferramenta formal a qual permite desenvolver uma teoria perturbativa para casos fora do equilíbrio de maneira análoga ao caso de equilíbrio.



Figura 2.1: Representação do contorno de ordenamento dos tempos usado na transformação da equação (2.1.9). Os tempos são ordenados de acordo com as duas disposições ao longo do contorno.

Embora ainda seja necessária uma segunda transformação sobre $\hat{A}_h(t)$, a equação (2.1.9) permite determinar a média de $\hat{A}_H(t)$ sem que seja necessária a menção à parte complicada do Hamiltoniano $\hat{H}'(t)$. A seguir a idéia do contorno de ordenamento temporal será aplicada no cálculo de funções de Green, as quais são definidas como médias de um produto de dois operadores em tempos diferentes.

2.2 Funções de Green de não-equilíbrio (FGNE)

Na teoria de equilíbrio é definida a função de Green ordenada temporalmente, também chamada função de Green *causal*:

$$\mathcal{G}^{t}(\mathbf{r},t;\mathbf{r}',t') = -i\langle \mathcal{T}\{\hat{\psi}_{H}(\mathbf{r},t)\hat{\psi}_{H}^{\dagger}(\mathbf{r}',t')\}\rangle$$
(2.2.1)

onde $\hat{\psi}_H(t) \in \hat{\psi}_H^{\dagger}(t')$ são operadores de campo fermiônicos e estão escritos na versão de Heisenberg. O operador \mathcal{T} é o operador de ordenamento temporal cuja ação é descrita na equação (2.1.6).

Esta função de Green constitui o elemento básico de uma teoria perturbativa que permite determinar as propriedades de sistemas de muitos corpos. Isto é possível devido ao teorema de Wick [86] que permite decompor as correlações de muitas partículas em somas e produtos de funções de Green do tipo definido pela equação (2.2.1).

Para o caso fora do equilíbrio, de interesse neste trabalho, também é possível construir uma teoria perturbativa estruturalmente equivalente ao caso de equilíbrio usando-se o operador de ordenamento temporal descrito na seção anterior. Desta forma, é definida a função de Green ordenada no contorno:

$$G(\mathbf{r},t;\mathbf{r}',t') = -i\langle \mathcal{T}_C\{\hat{\psi}_H(\mathbf{r},t)\hat{\psi}_H^{\dagger}(\mathbf{r}',t')\}\rangle$$
(2.2.2)

onde o contorno C percorre todo o eixo real passando uma única vez pelos pontos t e t' e termina no ponto de referência t_0 , figura 2.2. Na equação (2.2.2), como no caso de equilíbrio definido por (2.2.1), $\hat{\psi}_H(t) e \hat{\psi}_H^{\dagger}(t')$ são operadores de campo fermiônicos escritos na versão de Heisenberg. A



Figura 2.2: Representação do contorno de ordenamento dos tempos evidenciando os dois ramos existentes. Neste exemplo específico, a disposição dos tempos no contorno correspondem a função de Green $G^{<}(t, t')$.

função de Green (2.2.2) exerce uma função análoga à função de Green *causal* (2.2.1) exerce no caso de equilíbrio. Como será mostrado a seguir, $G^t(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t')$ possui uma expansão perturbativa baseada no teorema de Wick. Entretanto, desde que os rótulos temporais ficam sobre um contorno com dois ramos com ordenamentos temporais distintos, então existem quatro tipos de contrações possíveis o que implica na necessidade de se definir quatro funções de Green. Na versão de Heisenberg, as funções de Green são definidas da seguinte maneira:

$$G(\mathbf{r},t;\mathbf{r}',t') = \begin{cases} G^{t}(\mathbf{r},t;\mathbf{r}',t') = -i\langle \mathcal{T}\{\hat{\psi}_{H}(\mathbf{r},t)\hat{\psi}_{H}^{\dagger}(\mathbf{r}',t')\}\rangle & t,t' \in C_{1}, \\ G^{>}(\mathbf{r},t;\mathbf{r}',t') = -i\langle\hat{\psi}_{H}(\mathbf{r},t)\hat{\psi}_{H}^{\dagger}(\mathbf{r}',t')\rangle & t \in C_{2}, t' \in C_{1}, \\ G^{<}(\mathbf{r},t;\mathbf{r}',t') = i\langle\hat{\psi}_{H}^{\dagger}(\mathbf{r}',t')\hat{\psi}_{H}(\mathbf{r},t)\rangle & t \in C_{1}, t' \in C_{2}, \\ G^{\tilde{t}}(\mathbf{r},t;\mathbf{r}',t') = -i\langle\tilde{\mathcal{T}}\{\hat{\psi}_{H}(\mathbf{r},t)\hat{\psi}_{H}^{\dagger}(\mathbf{r}',t')\}\rangle & t,t' \in C_{2}. \end{cases}$$
(2.2.3)

onde o ramo superior do contorno de ordenamento temporal foi denotado por C_1 e o ramo inferior por C_2 .

A função de Green $G^t(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t')$ é a função de Green *causal*, ou ordenada temporalmente, que explicitamente pode ser escrita como:

$$G^{t}(\mathbf{r},t;\mathbf{r}',t') = -i\langle \mathcal{T}\{\hat{\psi}_{H}(\mathbf{r},t)\hat{\psi}_{H}^{\dagger}(\mathbf{r}',t')\}\rangle$$

$$= -i\vartheta(t-t')\langle\hat{\psi}_{H}(\mathbf{r},t)\hat{\psi}_{H}^{\dagger}(\mathbf{r}',t')\rangle + i\vartheta(t'-t)\langle\hat{\psi}_{H}^{\dagger}(\mathbf{r}',t')\hat{\psi}_{H}(\mathbf{r},t)\rangle \qquad (2.2.4)$$

onde as funções $\vartheta(x)$ são funções de Heaviside.

A função de Green $G^{\tilde{t}}(\mathbf{r},t;\mathbf{r}',t')$ é anti-ordenada temporalmente de modo que,

$$G^{\tilde{t}}(\mathbf{r},t;\mathbf{r}',t') = -i\langle \widetilde{\mathcal{T}} \{ \hat{\psi}_{H}(\mathbf{r},t) \hat{\psi}_{H}^{\dagger}(\mathbf{r}',t') \} \rangle$$

= $-i\vartheta(t-t') \langle \hat{\psi}_{H}(\mathbf{r},t) \hat{\psi}_{H}^{\dagger}(\mathbf{r}',t') \rangle + i\vartheta(t'-t) \langle \hat{\psi}_{H}^{\dagger}(\mathbf{r}',t') \hat{\psi}_{H}(\mathbf{r},t) \rangle$ (2.2.5)

Além das funções de Green definidas por (2.2.3), outras funções de Green que serão muito

utilizadas neste trabalho são as funções de Green avançada e retardada, as quais são definidas por,

$$G^{a}(\mathbf{r},t;\mathbf{r}',t') = i\vartheta(t'-t)\langle\{\hat{\psi}_{H}(\mathbf{r},t),\hat{\psi}_{H}^{\dagger}(\mathbf{r}',t')\}\rangle$$

= $\vartheta(t'-t)\left(G^{<}(\mathbf{r},t;\mathbf{r}',t') - G^{>}(\mathbf{r},t;\mathbf{r}',t')\right)$ (2.2.6)

e,

$$G^{r}(\mathbf{r},t;\mathbf{r}',t') = -i\vartheta(t-t')\langle\{\hat{\psi}_{H}(\mathbf{r},t),\hat{\psi}_{H}^{\dagger}(\mathbf{r}',t')\}\rangle$$

= $\vartheta(t-t')\left(G^{>}(\mathbf{r},t;\mathbf{r}',t') - G^{<}(\mathbf{r},t;\mathbf{r}',t')\right),$ (2.2.7)

onde as chaves $\{,\}$ denotam um anti-comutador entre os operadores de campo. As funções de Green G^a e G^r obedecem a equação de Dyson se uma função auto-energia para o problema estudado pode ser definida. É importante notar que $G^r - G^a = G^> - G^<$ de modo que somente três destas funções de Green são linearmente independentes. A função de Green $G^<$ pode ser determinada a partir da equação de Keldysh, que será deduzida com o uso dos procedimentos de continuação analítica apresentados na seção 2.3.

2.2.1 Versão de Interação

Com as definições das FGNE usando o contorno de ordenamento temporal, a teoria para o caso fora do equilíbrio pode ser feita de maneira equivalente ao caso de equilíbrio. Para que isso seja possível é necessário fazer uma transformação sobre as funções de Green de modo que o Teorema de Wick possa ser aplicado.

O primeiro passo é repetir a análise que permitiu escrever a equação (2.1.9), i.e., passar da versão de Heisenberg para a versão de interação onde a dependência temporal dos operadores é governada pelo Hamiltoniano \hat{h} , independente do tempo. O resultado é,

$$G(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') = -i \langle \mathcal{T}_C[\hat{S}_C^H \hat{\psi}_h(\mathbf{r}, t) \hat{\psi}_h^{\dagger}(\mathbf{r}', t')] \rangle$$
(2.2.8)

onde foi definido,

$$\hat{S}_C^H = \exp\left[-i\int_C d\tau H'_h(\tau)\right],\tag{2.2.9}$$

em que a integração é realizada sobre o contorno de ordenamento temporal C ilustrado na figura 2.2. A evolução temporal dos operadores de campo na definição (2.2.8) é determinada pelo Hamiltoniano \hat{h} que contém dois termos: $\hat{h} = \hat{H}_0 + \hat{H}_i$. Desde que o Teorema de Wick funciona apenas para operadores quadráticos é necessário aplicar uma segunda transformação na equação (2.2.8) de modo a eliminar a dependência com a parte interagente do Hamiltoniano. É importante notar a matriz densidade implícita na equação (2.2.8) também contém \hat{h} , e portanto, \hat{h} aparece em quatro lugares diferentes: $\varrho_{\hat{h}}$, \hat{S}_C^H e nos operadores de campo $\hat{\psi}_h(\mathbf{r}, t)$ e $\hat{\psi}_h^{\dagger}(\mathbf{r}', t')$.

Os detalhes da transformação são discutidos no apêndice A e aqui é mostrado o resultado final:

$$G(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') = -i \frac{\text{Tr}\left\{e^{-\beta \hat{H}_0} \mathcal{T}_{C^*}[S_{C^*}^i S_C' \hat{\psi}_{\hat{H}_0}(\mathbf{r}, t) \hat{\psi}_{\hat{H}_0}^{\dagger}(\mathbf{r}', t')]\right\}}{\text{Tr}\left\{e^{-\beta \hat{H}_0} \mathcal{T}_{C^*}\left(S_{C^*}^i S_C'\right)\right\}}$$
(2.2.10)

onde é definido,

$$S'_{C} = \exp\left\{-i \int_{C} d\tau \hat{H}'_{\hat{H}_{0}}(\tau)\right\}$$
(2.2.11)

$$S_{C^*}^i = \exp\left\{-i \int_{C^*} d\tau \hat{H}_{\hat{H}_0}^i(\tau)\right\}$$
(2.2.12)

e a dependência temporal dos Hamiltonianos é definida de maneira análoga à equação (2.1.4). Além disso, o contorno C é definido na figura 2.2 e o contorno C^* é definido na figura 2.3.



Figura 2.3: Representação do contorno de ordenamento temporal $C^* = C \cup C_u$ resultante das transformações aplicadas para passar os operadores para a versão de interação. A porção $C_u \equiv [t_0, t_0 - i\beta]$ é oriunda da transformação da matriz densidade e representa as correlações iniciais do sistema. No estado estacionário os efeitos das correlações iniciais são eliminados pelas interações. Neste caso pode-se tomar o limite $t_0 \to -\infty$ e eliminar esta porção do contorno.

A equação (2.2.10) permite que seja construída uma teoria de perturbação de maneira completamente análoga ao caso de equilíbrio. Esta expressão é um resultado exato, e a evolução temporal de todos os operadores é governada pelo Hamiltoniano simples \hat{H}_0 , permitindo o uso do Teorema de Wick. Como neste trabalho não há interesse em fenômenos transientes, pode-se fazer uma simplificação adicional na equação (2.2.10) fazendo $t_0 \rightarrow -\infty$ o que faz com que a contribuição da parte C_u desapareça, conforme indicado na referência [87]. No estado estacionário, de interesse neste trabalho, as correlações iniciais são eliminadas pelas interações. O denominador na equação (2.2.10) é reduzido à função partição para o sistema não interagente, e finalmente, pode-se escrever a expressão final para a função de Green ordenada no contorno,

$$G(\mathbf{r},t;\mathbf{r}',t') = -i\mathrm{Tr}\left\{\varrho_0 \mathcal{T}_C[S_C \hat{\psi}_{\hat{H}_0}(\mathbf{r},t)\hat{\psi}_{\hat{H}_0}^{\dagger}(\mathbf{r}',t')]\right\}$$
(2.2.13)

onde,

$$\varrho_0 = \frac{\exp(-\beta \hat{H}_0)}{\operatorname{Tr}[\exp(-\beta \hat{H}_0)]}$$
(2.2.14)

é operador estatístico ρ_0 para o estado de equilíbrio do sistema não-interagente a uma temperatura $T = 1/k_B\beta$. A última igualdade é obtida tendo-se em vista que a álgebra de operadores sob o contorno de ordenamento temporal é equivalente a de números permitindo definir \hat{S}_C como,

$$\hat{S}_{C} = \exp\left\{-i\int_{C} d\tau [\hat{H}_{H_{0}}^{i}(\tau) + \hat{H}_{H_{0}}^{\prime}(\tau)]\right\},$$
(2.2.15)

e a integração é realizada sobre o contorno C, definido na figura 2.2.

2.3 Continuação Analítica

Conforme discutido ao longo da seção 2.2, o contorno de ordenamento temporal permite definir funções de Green para o caso fora do equilíbrio de modo que estas tenham uma estrutura idêntica ao correspondente caso de equilíbrio. Com isso, os métodos perturbativos aplicados no caso de equilíbrio podem ser usados no presente caso. No entanto, para calcular quantidades físicas é necessário conhecer as funções de correlação $G^{<}$ e $G^{>}$ e as funções de Green retardada e avançada G^{r} e G^{a} . Estas quatro funções de Green são obtidas da função de Green ordenada no contorno (2.2.10) através de um procedimento chamado de *continuação analítica* [80].

A função de Green ordenada no contorno apresenta a mesma expansão perturbativa que a função de Green de equilíbrio (ordenada no tempo, eq. (2.2.1)). Em conseqüência, dado que um funcional de auto-energia possa ser definido, a função de Green ordenada no contorno tem a mesma equação de Dyson que a função de equilíbrio:

$$G(\tau_1, \tau_1') = G^0(\tau_1, \tau_1') + \int_C d\tau_2 \int_C d\tau_3 \ G^0(\tau_1, \tau_2) \Sigma(\tau_2, \tau_3) G(\tau_3, \tau_1'), \tag{2.3.1}$$

onde as interações estão incluídas na auto-energia (irredutível) $\Sigma[G]$.

Na equação de Dyson (2.3.1) serão encontrados termos com a estrutura C = AB, ou explicitamente

$$C(t_1, t_1') = \int_C d\tau \ A(t_1, \tau) B(\tau, t_1')$$
(2.3.2)

e suas generalizações, envolvendo o produto de três ou mais termos. Desde que o contorno é definido em termos de variáveis temporais, as variáveis espaciais foram suprimidas por simplicidade. Para resolver (2.3.2), assume-se que $t_1 <_c t'_1$, ou seja, t'_1 está na parte posterior do contorno em relação a t_1 , conforme mostrado na figura 2.4a. Considerando a definição (2.2.3), isso indica que C(t,t') é uma função do tipo $C^<$. O próximo passo consiste em deformar o contorno de maneira que se possa transformar cada ramo do contorno inicial em um novo contorno, conforme mostrado na figura 2.4b. Com isso, é possível escrever (2.3.2) na seguinte forma,

$$C^{<}(t_1, t_1') = \int_{C_1} d\tau \ A(t_1, \tau) B(\tau, t_1') + \int_{C_2} d\tau \ A(t_1, \tau) B(\tau, t_1')$$

Na integração sobre C_1 , $B(\tau, t'_1)$ apresenta τ confinado no primeiro contorno enquanto que t'_1 está definido no segundo contorno. Sendo assim, este também é uma função do tipo $B^{<}$ pois τ sempre será menor do que t'_1 ao longo de C_1 . Na integral sobre C_2 , pode-se usar os mesmos argumentos para $A(t_1, \tau)$, e neste caso, nota-se que τ está confinado em C_2 e, portanto, sempre será maior que t_1 o qual está definido em C_1 . Portanto $A(t_1, \tau)$ é uma também uma função do tipo $A^{<}$. Com estes argumentos, pode-se escrever,

$$C^{<}(t_1, t_1') = \int_{C_1} d\tau \ A(t_1, \tau) B^{<}(\tau, t_1') + \int_{C_2} d\tau \ A^{<}(t_1, \tau) B(\tau, t_1')$$
(2.3.3)

Considerando apenas a integral em C_1 , segue que,

$$\int_{C_1} d\tau \ A(t_1,\tau) B^{<}(\tau,t_1') = \int_{-\infty}^{t_1} dt \ A(t_1,t) B^{<}(t,t_1') + \int_{t_1}^{-\infty} dt \ A(t_1,t) B^{<}(t,t_1')$$

e observando as posições dos tempos no contorno C_1 , atribui-se os rótulos de > ou < para as funções de Green, resultando em:

$$\int_{C_1} d\tau \ A(t_1,\tau) B^{<}(\tau,t_1') = \int_{-\infty}^{t_1} dt \ A^{>}(t_1,t) B^{<}(t,t_1') + \int_{t_1}^{-\infty} dt \ A^{<}(t_1,t) B^{<}(t,t_1')$$

e invertendo os limites de integração da segunda integral pode-se escrever ainda,

$$\int_{C_1} d\tau \ A(t_1,\tau) B^{<}(\tau,t_1') = \int_{-\infty}^{t_1} dt \ A^{>}(t_1,t) B^{<}(t,t_1') - \int_{-\infty}^{t_1} dt \ A^{<}(t_1,t) B^{<}(t,t_1')$$



Figura 2.4: (a) Contorno C utilizado para definir a função de Green ordenada no contorno. (b) Contorno deformado para se obter a continuação analítica. O contorno inicia em t_0 , passa por $t_1 e t'_1 e$ retorna a t_0 . No caso estacionário toma-se $t_0 \rightarrow -\infty$.

ou ainda, agrupando as duas integrais,

$$\int_{C_1} d\tau \ A(t_1,\tau) B^{<}(\tau,t_1') = \int_{-\infty}^{t_1} dt \ [A^{>}(t_1,t) - A^{<}(t_1,t)] B^{<}(t,t_1').$$

O limite superior de integração pode ser estendido usando-se uma função de Heaviside, assim,

$$\int_{C_1} d\tau \ A(t_1,\tau) B^{<}(\tau,t_1') = \int_{-\infty}^{+\infty} dt \ \vartheta(t_1-t) [A^{>}(t_1,t) - A^{<}(t_1,t)] B^{<}(t,t_1')$$

e usando a definição de função de Green retardada, pode-se definir uma função análoga, $A^{r}(t_{1},t)$, logo,

$$A^{r}(t_{1},t) = \vartheta(t_{1}-t)[A^{>}(t_{1},t) - A^{<}(t_{1},t)]$$

de modo que,

$$\int_{C_1} d\tau \ A(t_1,\tau) B^{<}(\tau,t_1') = \int_{-\infty}^{+\infty} dt \ A^r(t_1,t) B^{<}(t,t_1').$$
(2.3.4)

A segunda integral, sobre o contorno C_2 , é obtida de maneira análoga, aqui é apresentado apenas o resultado,

$$\int_{C_2} d\tau \ A^<(t_1,\tau)B(\tau,t_1') = \int_{-\infty}^{+\infty} dt \ A^<(t_1,t)B^a(t,t_1').$$
(2.3.5)
Finalmente, usando (2.3.4) e (2.3.5), pode-se escrever $C^{<}$ na forma:

$$C^{<}(t_1, t_1') = \int_{-\infty}^{+\infty} dt \ [A^r(t_1, t)B^{<}(t, t_1') + A^{<}(t_1, t)B^a(t, t_1')].$$
(2.3.6)

Caso fosse tomada a ordem inversa dos tempos na figura 2.4a, seria possível obter uma expressão análoga para $C^>$. No entanto, isso pode ser feito diretamente bastando trocar os índices > por < em (2.3.6).

É possível generalizar este resultado para o produto de três funções: se D = ABC no contorno, então no eixo real o resultado é,

$$D = \int_{C} ABC \Rightarrow D^{<} = \int dt \ [A^{r}B^{r}C^{<} + A^{r}B^{<}C^{a} + A^{<}B^{a}C^{a}], \qquad (2.3.7)$$

novamente um resultado similar pode ser obtido para a função de Green $D^>$.

Muitas vezes é necessária a componente retardada de um produto de funções definidas no contorno. Combinando as definições (2.2.3), pode-se escrever a função retardada C^r em termos das funções de correlação $C^>$ e $C^<$ da seguinte forma,

$$C^{r}(t_{1},t_{1}') = \vartheta(t_{1}-t_{1}')[C^{>}(t_{1},t_{1}') - C^{<}(t_{1},t_{1}')]$$

e substituindo a equação (2.3.6) e a correspondente para $C^>$ pode-se escrever ainda,

$$C^{r}(t_{1},t_{1}') = \vartheta(t_{1}-t_{1}') \int_{-\infty}^{+\infty} dt \left[A^{r}(t_{1},t)B^{>}(t,t_{1}') + A^{>}(t_{1},t)B^{a}(t,t_{1}') - A^{r}(t_{1},t)B^{<}(t,t_{1}') - A^{<}(t_{1},t)B^{a}(t,t_{1}') \right]$$

e agrupando os termos correspondentes, segue que,

$$C^{r}(t_{1},t_{1}') = \vartheta(t_{1}-t_{1}') \int_{-\infty}^{+\infty} dt \left(A^{r}(t_{1},t) [B^{>}(t,t_{1}') - B^{<}(t,t_{1}')] + [A^{>}(t_{1},t) - A^{<}(t_{1},t)] B^{a}(t,t_{1}') \right).$$

Substituindo as definições de $A^r(t_1, t)$ e $B^a(t, t'_1)$, tem-se que,

$$C^{r}(t_{1},t_{1}') = \vartheta(t_{1}-t_{1}') \left[\int_{-\infty}^{+\infty} dt \ \vartheta(t_{1}-t) [A^{>}(t_{1},t) - A^{<}(t_{1},t)] [B^{>}(t,t_{1}') - B^{<}(t,t_{1}')] + \int_{-\infty}^{+\infty} dt \ \vartheta(t_{1}'-t) [A^{>}(t_{1},t) - A^{<}(t_{1},t)] [B^{<}(t,t_{1}') - B^{>}(t,t_{1}')] \right]$$

e devidos às funções de Heaviside nos integrandos, pode-se limitar a integração no intervalo,

$$C^{r}(t_{1},t_{1}') = \vartheta(t_{1}-t_{1}') \left[\int_{-\infty}^{+t_{1}} dt \ [A^{>}(t_{1},t) - A^{<}(t_{1},t)] [B^{>}(t,t_{1}') - B^{<}(t,t_{1}')] + \int_{-\infty}^{+t_{1}'} dt \ [A^{>}(t_{1},t) - A^{<}(t_{1},t)] [B^{<}(t,t_{1}') - B^{>}(t,t_{1}')] \right]$$

e invertendo os limites da segunda integração e a ordem do segundo fator, segue que,

$$C^{r}(t_{1},t_{1}') = \vartheta(t_{1}-t_{1}') \left[\int_{-\infty}^{+t_{1}} dt \ [A^{>}(t_{1},t) - A^{<}(t_{1},t)] [B^{>}(t,t_{1}') - B^{<}(t,t_{1}')] + \int_{+t_{1}'}^{-\infty} dt \ [A^{>}(t_{1},t) - A^{<}(t_{1},t)] [B^{>}(t,t_{1}') - B^{<}(t,t_{1}')] \right]$$

e com isso, pode-se novamente juntar as duas integrais em uma só,

$$C^{r}(t_{1},t_{1}') = \vartheta(t_{1}-t_{1}') \int_{t_{1}'}^{t_{1}} dt \ [A^{>}(t_{1},t) - A^{<}(t_{1},t)] [B^{>}(t,t_{1}') - B^{<}(t,t_{1}')].$$

Usando o fato de que $\vartheta(t_1 - t'_1) = \vartheta(t_1 - t)\vartheta(t - t'_1)$, então finalmente pode-se escrever,

$$C^{r}(t_{1}, t_{1}') = \int_{t_{1}'}^{t_{1}} dt \ A^{r}(t_{1}, t)B^{r}(t, t_{1}').$$
(2.3.8)

O resultado (2.3.8) pode ser generalizado para o produto de três ou mais funções. Para o caso de três funções o resultado é dado por,

$$D^r = \int dt \ A^r B^r C^r. \tag{2.3.9}$$

Além dos exemplos mostrados, existem outras relações que podem ser obtidas seguindo os procedimentos descritos nesta seção. Na próxima seção, a continuação analítica é empregada na equação de Dyson (2.3.1) com o objetivo de obter uma equação¹ para $G^{<}$.

2.4 A equação de Keldysh

A equação de Dyson (2.3.1) é definida sobre o contorno de ordenamento temporal, e com o objetivo de aplicá-la para resolver problemas físicos, é necessário reescrevê-la em termos de variáveis reais. A equação (2.3.1) é dada por,

$$G(\tau_1, \tau_1') = G^0(\tau_1, \tau_1') + \int_C d\tau_2 \int_C d\tau_3 \ G^0(\tau_1, \tau_2) \Sigma(\tau_2, \tau_3) G(\tau_3, \tau_1')$$

por simplicidade serão omitidos os argumentos das funções de Green e auto-energia e também as integrações sabendo-se que as mesmas estão implícitas:

$$G = G_0 + G_0 \Sigma G$$

¹É possível também obter equações para as demais funções de Green $G^>$, G^r e G^a seguindo os mesmos procedimentos.

e aplicando a equação (2.3.7) sobre a equação de Dyson segue que,

$$G^{<} = G_{0}^{<} + G_{0}^{r} \Sigma^{r} G^{<} + G_{0}^{r} \Sigma^{<} G^{a} + G_{0}^{<} \Sigma^{a} G^{a}$$

Desde que o objetivo é obter $G^{<}$, é realizada uma iteração na equação acima em relação a $G^{<}$

$$G^{<} = G_{0}^{<} + G_{0}^{r} \Sigma^{<} G^{a} + G_{0}^{<} \Sigma^{a} G^{a} + G_{0}^{r} \Sigma^{r} (G_{0}^{<} + G_{0}^{r} \Sigma^{r} G^{<} + G_{0}^{r} \Sigma^{<} G^{a} + G_{0}^{<} \Sigma^{a} G^{a})$$

$$G^{<} = G_{0}^{<} + G_{0}^{r} \Sigma^{<} G^{a} + G_{0}^{<} \Sigma^{a} G^{a} + G_{0}^{r} \Sigma^{r} G_{0}^{r} \Sigma^{<} G^{a} + G_{0}^{r} \Sigma^{r} G_{0}^{<} \Sigma^{a} G^{a} + G_{0}^{r} \Sigma^{r} G_{0}^{<} \Sigma^{r} G_{0}^{<} \Sigma^{r} G^{<} + G_{0}^{r} \Sigma^{r} G^{~} + G_{0}^{r} \Sigma^{r} + G_$$

e agrupando os termos,

$$G^{<} = G_{0}^{<}(1 + \Sigma^{a}G^{a}) + (G_{0}^{r} + G_{0}^{r}\Sigma^{r}G_{0}^{r})\Sigma^{<}G^{a} + G_{0}^{r}\Sigma^{r}G_{0}^{<}(1 + \Sigma^{a}G^{a}) + G_{0}^{r}\Sigma^{r}G_{0}^{r}\Sigma^{r}G^{<}.$$

Iterando mais uma vez, tem-se que,

$$\begin{split} G^{<} &= G_{0}^{<}(1 + \Sigma^{a}G^{a}) + (G_{0}^{r} + G_{0}^{r}\Sigma^{r}G_{0}^{r})\Sigma^{<}G^{a} + G_{0}^{r}\Sigma^{r}G_{0}^{<}(1 + \Sigma^{a}G^{a}) + G_{0}^{r}\Sigma^{r}G_{0}^{r}\Sigma^{r}(G_{0}^{<} + G_{0}^{r}\Sigma^{r}G^{<} + G_{0}^{r}\Sigma^{<}G^{a} + G_{0}^{r}\Sigma^{<}G^{a} + G_{0}^{r}\Sigma^{a}G^{a}) \end{split}$$

e efetuando as multiplicações:

$$\begin{aligned} G^{<} &= G_{0}^{<}(1 + \Sigma^{a}G^{a}) + (G_{0}^{r} + G_{0}^{r}\Sigma^{r}G_{0}^{r})\Sigma^{<}G^{a} + G_{0}^{r}\Sigma^{r}G_{0}^{<}(1 + \Sigma^{a}G^{a}) + \\ &+ G_{0}^{r}\Sigma^{r}G_{0}^{r}\Sigma^{r}G_{0}^{<} + G_{0}^{r}\Sigma^{r}G_{0}^{r}\Sigma^{r}G_{0}^{r}\Sigma^{r}G_{0}^{<}\Sigma^{r}G_{0}^{r}\Sigma^{r}G_{0}^$$

e agrupando novamente os termos, obtém-se que,

$$\begin{split} G^{<} &= G_{0}^{<}(1 + \Sigma^{a}G^{a}) + (G_{0}^{r} + G_{0}^{r}\Sigma^{r}G_{0}^{r} + G_{0}^{r}\Sigma^{r}G_{0}^{r}\Sigma^{r}G_{0}^{r} + \ldots)\Sigma^{<}G^{a} \\ &+ (G_{0}^{r}\Sigma^{r} + G_{0}^{r}\Sigma^{r}G_{0}^{r}\Sigma^{r} + \ldots)G_{0}^{<} + (G_{0}^{r}\Sigma^{r} + G_{0}^{r}\Sigma^{r}G_{0}^{r}\Sigma^{r} + \ldots)G_{0}^{<}\Sigma^{a}G^{a}. \end{split}$$

A equação acima sugere que com um número infinito de iterações pode-se obter:

$$G^< = G_0^<(1+\Sigma^aG^a) + G^r\Sigma^< G^a + G^r\Sigma^rG_0^< + G^r\Sigma^rG_0^<\Sigma^aG^a$$

e colocando alguns termos em evidência,

$$G^{<} = G_{0}^{<}(1 + \Sigma^{a}G^{a}) + G^{r}\Sigma^{r}G_{0}^{<}(1 + \Sigma^{a}G^{a}) + G^{r}\Sigma^{<}G^{a},$$

ou ainda,

$$G^{<} = (G_{0}^{<} + G^{r}\Sigma^{r}G_{0}^{<})(1 + \Sigma^{a}G^{a}) + G^{r}\Sigma^{<}G^{a}$$

e fatorando $G_0^<,$ tem-se finalmente a equação de Keldysh para $G^<:$

$$G^{<} = (1 + G^{r} \Sigma^{r}) G_{0}^{<} (1 + \Sigma^{a} G^{a}) + G^{r} \Sigma^{<} G^{a}.$$
(2.4.1)

Esta equação tem dois termos: o primeiro corresponde ao decaimento inicial do sistema enquanto que o segundo termo é o termo de espalhamento. Desde que neste trabalho o interesse está no estado estacionário do sistema, o primeiro termo não irá contribuir.

Para completar a análise é necessário obter as equações para as funções de Green G^r e G^a . Isso é obtido aplicando as regras de Langreth na equação de Dyson (2.3.1). O desenvolvimento é análogo ao realizado para obter (2.4.1) e, portanto, é apresentado apenas o resultado:

$$G^{r,a} = G^{r0,a0} + G^{r0,a0} \Sigma^{r,a} G^{r,a}.$$
(2.4.2)

As equações (2.4.1) e (2.4.2) são os resultados centrais deste capítulo e formam o conjunto básico de equações que permitem determinar as propriedades de transporte de um sistema fora do equilíbrio. No próximo capítulo, estas equações serão aplicadas no estudo de uma nanoestrutura híbrida composta de dois pontos quânticos em série conectados a um eletrodo supercondutor e a dois eletrodos ferromagnéticos.

2.5 Formalismo de Keldysh para nanoestruturas híbridas

No contexto de problemas de tunelamento, o formalismo de Keldysh pode ser introduzido da seguinte forma: Para $t < t_0$ os eletrodos [i.e., o eletrodo esquerdo (L) e direito (R)] estão desacoplados da região central (C), e cada região está em equilíbrio térmico, veja figura 2.5. As funções distribuição de equilíbrio para as três regiões são caracterizadas por seus respectivos potenciais químicos; estes não precisam coincidir nem as diferenças entres os potenciais químicos são necessariamente pequenas. Os acoplamentos V_{CR} e V_{CL} entre as diferentes regiões são então ligadas para $t > t_0$ e tratadas como perturbações dentro do contexto de não-equilíbrio descrito neste capítulo. Para modelar este sistema é definido um Hamiltoniano dado pela seguinte forma geral:

$$\hat{H} = \hat{H}_L + \hat{H}_R + \hat{H}_C + \hat{H}_T \tag{2.5.1}$$

onde $\hat{H}_L + \hat{H}_R$ descreve os eletrodos, \hat{H}_T é o tunelamento entre os eletrodos e a região central e \hat{H}_C modela a região central na qual pode ser considerada a presença de interações. Para fazer uma correspondência com o formalismo geral desenvolvido neste capítulo, o termo \hat{H}_T corresponde a parte $\hat{H}'(t)$ do Hamiltoniano (2.1.1); os eletrodos $\hat{H}_L + \hat{H}_R$ correspondem a \hat{H}_0 desde que os elétrons nos eletrodos são considerados não interagentes; os termo descrevendo a parte central do sistema corresponde a parte interagente \hat{H}_i de (2.1.1).



Figura 2.5: Para $t < t_0$ os eletrodos L e R estão desacoplados da região central C encontrando-se em equilíbrio com seus respectivos reservatórios com diferentes potenciais químicos. Para $t > t_0$ o potencial de acoplamento entre os eletrodos e a região central é ligado e uma corrente é estabelecida pela aplicação de um potencial elétrico $eV = \mu_L - \mu_R$. [81].

Desde que os elétrons são considerados não interagentes nos eletrodos L e R, o Hamiltoniano $\hat{H}_L + \hat{H}_R$ pode ser escrito da seguinte forma,

$$\hat{H}_L + \hat{H}_R = \sum_{k\sigma} \epsilon_{k\sigma} a^{\dagger}_{k\sigma} a_{k\sigma} + \sum_{p\sigma} \epsilon_{p\sigma} b^{\dagger}_{p\sigma} b_{p\sigma}.$$
(2.5.2)

O tunelamento entre os eletrodos e a região central pode ser definido por,

$$\hat{H}_T = \sum_{k\sigma} [V_{CL,k\sigma} c^{\dagger}_{\sigma} a_{k\sigma} + V_{CR,k\sigma} c^{\dagger}_{\sigma} b_{k\sigma} + \text{H.c.}], \qquad (2.5.3)$$

onde o primeiro termo transfere elétrons do eletrodo L para a região central C com amplitude $V_{CL,k\sigma}$ e o segundo termo transfere elétrons do eletrodo R para a região central com amplitude $V_{CR,k\sigma}$. Os termos conjugados representam os processos inversos.

A forma escolhida para a região central depende da geometria e do processo físico a ser investigado. Em particular, para os sistemas que serão considerados neste trabalho de tese, a região central é modelada por um Hamiltoniano tipo Anderson [88] considerando interações intra e inter pontos quânticos (veja figura 1.4 do capítulo 1),

$$\hat{H}_{C} = \sum_{\sigma} \epsilon_{a\sigma} \hat{n}_{a\sigma} + \sum_{\sigma} \epsilon_{b\sigma} \hat{n}_{b\sigma} + \mathcal{U}[\hat{n}_{a\uparrow} \hat{n}_{a\downarrow} + \hat{n}_{b\uparrow} \hat{n}_{b\downarrow}] + \mathcal{K} \sum_{\sigma} [\hat{n}_{a\sigma} \hat{n}_{a\sigma'} + \hat{n}_{b\sigma} \hat{n}_{b\sigma'}] + \sum_{\sigma} [t_{ab} c^{\dagger}_{a\sigma} c_{b\sigma} + t^{*}_{ab} c^{\dagger}_{b\sigma} c_{a\sigma}]. \quad (2.5.4)$$

Na equação (2.5.4), o primeiro e segundo termos representam os pontos quânticos isolados, cada um com um nível degenerado em spin ϵ_{σ} , rotulados por $a \in b$. O termo com \mathcal{U} descreve a interação intra ponto quântico e \mathcal{K} descreve a repulsão inter pontos quânticos. O último termo representa a transferência de elétrons entre os pontos quânticos ("hopping"). Este Hamiltoniano permite modelar um sistema composto por pontos quânticos duplos dentro do formalismo de Keldysh.

Uma vez definido o Hamiltoniano (2.5.1), as equações (2.4.1) e (2.4.2) podem ser aplicadas para determinar as funções de Green no formalismo de não equilíbrio. Estas funções de Green permitem o cálculo de quantidades físicas de maneira direta. Por exemplo, a ocupação média pode ser obtida fazendo t = t' e $\mathbf{r} = \mathbf{r}'$ na definição de $G^{<}$:

$$\langle \hat{n}(\mathbf{r}) \rangle = -iG^{<}(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}, t).$$
(2.5.5)

A densidade de corrente (**j**) também pode ser obtida a partir da função de Green de correlação, $G^{<}$. A expressão geral de **j** é dada por,

$$\mathbf{j}(\mathbf{r},t) = \frac{\hbar^2}{2m} \lim_{\mathbf{r}' \to \mathbf{r}} (\nabla_{\mathbf{r}} - \nabla_{\mathbf{r}'}) \lim_{\varepsilon \to 0} G^{<}(\mathbf{r},t;\mathbf{r}',t+\varepsilon).$$
(2.5.6)

As funções de Green retardada e avançada contém informação sobre as propriedades espectrais do sistema. No espaço de Fourier, a densidade de estados pode ser escrita da seguinte forma:

$$D(\epsilon) = \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \ i[G^r(\mathbf{k},\epsilon) - G^a(\mathbf{k},\epsilon)].$$
(2.5.7)

Estes são alguns exemplos de quantidades físicas que podem ser obtidas diretamente das funções de Green. No próximo capítulo o formalismo de Keldysh será aplicado ao sistema $(F_1, F_2) - PQ_a - PQ_b - S$ adotando-se o procedimento descrito nesta seção.

Aplicação do formalismo de Keldysh ao sistema $(F_1, F_2) - PQ_a - PQ_b - S$

3.1 Modelo e Formulação

Neste trabalho será considerado uma nanoestrutura híbrida mostrada no diagrama esquemático da figura 3.1. Na parte central existem dois pontos quânticos conectados em série denotados por a e b. Estes pontos quânticos estão conectados a terminais que permitem aplicar um potencial de gate os quais são chamados V_{ga} e V_{gb} . O ponto quântico b está conectado a um eletrodo supercondutor, o qual é mantido aterrado. O ponto quântico a está conectado aos dois eletrodos ferromagnéticos denominados 1 e 2, os quais são submetidos a potenciais V_1 e V_2 , respectivamente. A magnetização do ferromagneto 1 é definida como sendo o eixo \hat{z} enquanto que a magnetização do ferromagneto 2 está orientada em uma direção \hat{z}' a qual faz um ângulo θ com a direção \hat{z} . Será considerado que a direção θ pode ser variada de modo que a magnetização dos ferromagnetos pode ser variada desde uma configuração paralela quando $\hat{z}' = \hat{z}$ até a uma configuração antiparalela onde $\hat{z}' = -\hat{z}$.

3.1.1 Hamiltonianos supercondutor e ferromagnético

Será considerado que o movimento dos elétrons está confinado ao longo da direção longitudinal \hat{x} como mostrado na figura 3.1. Será adotado o modelo de Stoner [89] para os eletrodos ferromagnéticos e o Hamiltoniano BCS para o supercondutor [90].

No modelo de Stoner o ferromagnetismo é introduzido por um campo médio \mathbf{h} , que separa as bandas de elétrons com spin up da banda de elétrons com spin down. O Hamiltoniano é escrito da seguinte forma,

$$\hat{H}_F = \int dx \; \hat{\Psi}^{\dagger}(x) \left(-\frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla_x^2 - \hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \mathbf{h} - \mu \right) \hat{\Psi}(x), \tag{3.1.1}$$



Figura 3.1: Diagrama esquemático do sistema estudado neste trabalho de tese. A nanoestrutura é composta por dois pontos quânticos em série, denominados a e b, conectados a eletrodos ferromagnéticos e supercondutores. Ao ponto quântico a estão ligados dois eletrodos ferromagnéticos F_1 e F_2 , submetidos a potenciais V_1 e V_2 , respectivamente. O eletrodo supercondutor é conectado ao ponto quântico b e o mesmo é mantido aterrado. A corrente que entra no supercondutor é oriunda da soma das correntes de cada eletrodo ferromagnético.

onde m^* é a massa efetiva, $\hat{\boldsymbol{\sigma}} = (\hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_y, \hat{\sigma}_z)$ é o operador de spin de Pauli, μ é o potencial químico e $\hat{\Psi}^{\dagger}(x) = (\hat{\psi}^{\dagger}_{\uparrow}, \hat{\psi}^{\dagger}_{\downarrow})$ é o spinor de campo. No que segue, será assumido que a magnetização **h** faz um ângulo θ em relação ao eixo \hat{z} , enquanto que será ignorada a direção perpendicular à direção de transporte desde que esta não é relevante para as propriedades de transporte, conforme discutido na referência [91].

Dentro da aproximação de campo médio, o supercondutor é modelado pelo Hamiltoniano BCS, dado por:

$$\hat{H}_{S} = \sum_{\sigma} \int dx \; \hat{\Psi}_{\sigma}^{\dagger}(x) \left(-\frac{\hbar^{2}}{2m^{*}} \nabla_{x}^{2} - \mu \right) \hat{\Psi}_{\sigma}(x) + \int dx \; [\Delta(x) \hat{\Psi}_{\uparrow}^{\dagger}(x) \hat{\Psi}_{\downarrow}^{\dagger}(x) + \Delta^{*}(x) \hat{\Psi}_{\downarrow}(x) \hat{\Psi}_{\uparrow}(x)].$$

$$(3.1.2)$$

Na equação (3.1.2), $\hat{\Psi}_{\sigma}^{\dagger}$ é o operador de campo para elétrons com spin $\sigma =\uparrow,\downarrow, \Delta(x) = U\langle \hat{\Psi}_{\downarrow}(x)\hat{\Psi}_{\uparrow}(x)\rangle$ é o potencial de pares, com a constante U caracterizando a atração elétron-elétron. Em geral, o potencial de pares deve ser determinado de maneira auto-consistente, e neste trabalho será assumido que o potencial de pares independe da posição e da energia. O potencial de pares é, em geral, uma grandeza complexa cujo módulo é o gap de energia do espectro de excitações do supercondutor. Desde que este trabalho está restrito à sistemas com apenas um supercondutor, a fase do potencial de pares pode ser descartada de modo que Δ pode ser considerado real. Esta suposição não é válida caso fosse considerado um segundo supercondutor e a fase não poderia ser eliminada dos cálculos [92].

Neste trabalho serão consideradas as propriedades de transporte dos elétrons, por esta razão, é

conveniente trabalhar com o Hamiltoniano no espaço k. Expandindo o operador de campo do elétron na direção longitudinal como $\hat{\Psi}_{\sigma}(x) = \sum_{k} e^{ikx} a_{k\sigma}(e^{ikx}s_{k\sigma})$ é possível escrever os Hamiltonianos para o ferromagneto e o supercondutor da seguinte forma,

$$\hat{H}_F = \sum_{k\sigma} [\epsilon_k - \operatorname{sgn}(\sigma)h\cos\theta - \mu_F] b^{\dagger}_{k\sigma} b_{k\sigma} - \sum_{k\sigma} h\sin\theta b^{\dagger}_{k\sigma} b_{k\bar{\sigma}}$$
(3.1.3)

e,

$$\hat{H}_S = \sum_{k\sigma} (\epsilon_k - \mu_S) s^{\dagger}_{k\sigma} s_{k\sigma} + \sum_k \left(\Delta s^{\dagger}_{k\uparrow} s^{\dagger}_{-k\downarrow} + \Delta^* s_{-k\downarrow} s_{k\uparrow} \right).$$
(3.1.4)

onde $\epsilon_k = \hbar^2 k^2 / 2m^*$ e $\bar{\sigma}$ corresponde ao spin oposto de σ . Os operadores $b_{k\sigma}(b_{k\sigma}^{\dagger})$ e $s_{k\sigma}(s_{k\sigma}^{\dagger})$ são operadores de aniquilação (criação) de elétrons com vetor de onda k e spin σ dos eletrodos ferromagnéticos e supercondutor, respectivamente.

Em supercondutores existem correlações entre dois operadores de criação ou dois operadores de aniquilação com spins opostos os quais estão relacionados com a correlação elétron-buraco. Quando os ferromagnetos são introduzidos, a correlação entre um operador de criação e aniquilação com mesmo sinal de spin também precisa ser considerada. Para incorporar estes dois tipos de correlações de modo unificado e tratar ambos os eletrodos de igual maneira é introduzida a notação de Nambu generalizada para o espaço partícula-buraco com quatro dimensões [93]. Definindo o spinor $\hat{\Phi}_{fk} =$ $(\hat{b}_{k\uparrow}^{\dagger} \ \hat{b}_{k\downarrow} \ \hat{b}_{k\downarrow} \ \hat{b}_{k\downarrow})^{\dagger}$ para o eletrodo ferromagnético e $\hat{\Phi}_{sk} = (\hat{s}_{k\uparrow}^{\dagger} \ \hat{s}_{k\downarrow} \ \hat{s}_{k\downarrow} \ \hat{s}_{k\uparrow})^{\dagger}$, para o eletrodo supercondutor, é possível reescrever os Hamiltonianos (3.1.3) e (3.1.4) da seguinte forma,

$$\hat{H}_F(\theta) = \sum_k \hat{\mathbf{\Phi}}_{fk}^{\dagger} \hat{\mathbf{E}}_{F,k}(\theta) \hat{\mathbf{\Phi}}_{fk}$$
(3.1.5)

onde,

$$\hat{\mathbf{E}}_{F,k}(\theta) = \begin{pmatrix} \epsilon_k - h\cos\theta - \mu_F & 0 & -h\sin\theta & 0\\ 0 & -(\epsilon_k + h\cos\theta - \mu_F) & h\sin\theta\\ -h\sin\theta & 0 & \epsilon_k + h\cos\theta - \mu_F & 0\\ 0 & h\sin\theta & 0 & -(\epsilon_k - h\cos\theta - \mu_F) \end{pmatrix}$$

Aqui é conveniente reescrever $\hat{\mathbf{E}}_{F,k}$ em termos de $\epsilon_{k\sigma} = \epsilon_k - \operatorname{sgn}(\sigma)h - \mu_F$. Usando esta definição na matriz $\hat{\mathbf{E}}_{F,k}$ tem-se que,

$$\hat{\mathbf{E}}_{F,k}(\theta) = \begin{pmatrix} c^2 \epsilon_{k\uparrow} + s^2 \epsilon_{k\downarrow} & 0 & sc(\epsilon_{k\uparrow} - \epsilon_{k\downarrow}) & 0 \\ 0 & -(c^2 \epsilon_{k\downarrow} + s^2 \epsilon_{k\uparrow}) & -sc(\epsilon_{k\uparrow} - \epsilon_{k\downarrow}) \\ sc(\epsilon_{k\uparrow} - \epsilon_{k\downarrow}) & 0 & c^2 \epsilon_{k\downarrow} + s^2 \epsilon_{k\uparrow} & 0 \\ 0 & -sc(\epsilon_{k\uparrow} - \epsilon_{k\downarrow}) & 0 & -(c^2 \epsilon_{k\uparrow} + s^2 \epsilon_{k\downarrow}) \end{pmatrix}$$

 $\operatorname{com} s \equiv \operatorname{sen} \theta/2 \, \operatorname{e} c \equiv \cos \theta/2$.

No caso do metal supercondutor, o Hamiltoniano é dado por,

$$\hat{H}_S = \sum_k \hat{\mathbf{\Phi}}_{sk}^{\dagger} \hat{\mathbf{E}}_{S,k} \hat{\mathbf{\Phi}}_{sk}$$
(3.1.6)

e a matriz $\mathbf{\hat{E}}_{S,k}$ é dada por,

$$\hat{\mathbf{E}}_{S,k} = \begin{pmatrix} \epsilon_k - \mu_S & \Delta & 0 & 0 \\ \Delta & -(\epsilon_k - \mu_S) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & (\epsilon_k - \mu_S) & -\Delta \\ 0 & 0 & -\Delta & -(\epsilon_k - \mu_S) \end{pmatrix}$$

No sistema apresentado na figura 3.1, o eletrodo F_1 é modelado pelo Hamiltoniano $\hat{H}_1 = \hat{H}_F(\theta = 0)$ e o eletrodo F_2 é descrito pelo próprio Hamiltoniano $\hat{H}_2 = \hat{H}_F(\theta)$.

3.1.2 Hamiltoniano do ponto quântico duplo

Será considerado que os pontos quânticos apresentam apenas um nível degenerado em spin que pode ser deslocado por um potencial de gate em cada ponto quântico. Também serão consideradas interações entre os pontos quânticos, caracterizada pela constante \mathcal{K} , e interações em cada ponto quântico, caracterizada pela constante \mathcal{U} . O tunelamento ("hopping") será descrito pelo constante t_{ab} , de modo que o Hamiltoniano completo é dado por:

$$\hat{H}'_{dqd} = \sum_{\sigma} (\epsilon_{a\sigma} - eV_{ga})\hat{n}_{a\sigma} + \sum_{\sigma} (\epsilon_{b\sigma} - eV_{gb})\hat{n}_{b\sigma} + \mathcal{U}[\hat{n}_{a\uparrow}\hat{n}_{a\downarrow} + \hat{n}_{b\uparrow}\hat{n}_{b\downarrow}] + \sum_{\sigma} \mathcal{K}\hat{n}_{a\sigma}\hat{n}_{b\sigma} + \sum_{\sigma} [t_{ab}c_{a\sigma}c^{\dagger}_{b\sigma} + \text{H.c.}]. \quad (3.1.7)$$

O Hamiltoniano (3.1.7) não possui solução exata devido aos termos de interação. Desta forma, estas interações serão tratadas dentro da aproximação de campo médio que permite escrever (3.1.7) na forma de um Hamiltoniano de uma partícula,

$$\hat{H}_{dqd} = \sum_{\sigma} E_{a\sigma} \hat{n}_{a\sigma} + \sum_{\sigma} E_{b\sigma} \hat{n}_{b\sigma} + \sum_{\sigma} [t_{ab} c^{\dagger}_{a\sigma} c_{b\sigma} + \text{h.c.}]$$
(3.1.8)

onde,

$$E_{a\sigma} = \epsilon_a - V_{ga} + \frac{\mathcal{K}}{2} \left\langle \hat{n}_b \right\rangle + \frac{\mathcal{U}}{2} \left\langle \hat{n}_{a\bar{\sigma}} \right\rangle,$$
$$E_{b\sigma} = \epsilon_b - V_{gb} + \frac{\mathcal{K}}{2} \left\langle \hat{n}_a \right\rangle + \frac{\mathcal{U}}{2} \left\langle \hat{n}_{b\bar{\sigma}} \right\rangle$$

Na aproximação de campo médio os níveis dos pontos quânticos são renormalizados pelos valores médios das ocupações. No caso da interação \mathcal{U} , a renormalização levanta a degenerescência de spin. A aproximação de campo médio é a primeira aproximação que é realizada no tratamento de interações. No limite de baixos valores de correlação e com polarização finita dos ferromagnetos, esta aproximação permite capturar a física envolvida nestes sistemas. É válido observar que as ocupações médias são determinadas de maneira auto-consistente. A aproximação de campo médio é extremamente útil no sentido de fornecer uma descrição qualitativa apropriada das interações e sua validade usualmente extrapola as previsões teóricas. No entanto, a exata validade dos resultados obtidos através desta aproximação pode ser avaliada apenas através de experimentos.

O Hamiltoniano (3.1.8) deve ser expresso na notação de Nambu [93]. Assim, este é reescrito na seguinte forma,

$$\hat{H}_{dqd} = \hat{\Psi}_a^{\dagger} \hat{\mathbf{E}}_a \hat{\Psi}_a + \hat{\Psi}_b^{\dagger} \hat{\mathbf{E}}_b \hat{\Psi}_b + \hat{\Psi}_a^{\dagger} \hat{\mathbf{t}}_{ab} \hat{\Psi}_b + \hat{\Psi}_b^{\dagger} \hat{\mathbf{t}}_{ab}^{\dagger} \hat{\Psi}_a, \qquad (3.1.9)$$

onde,

$$\hat{\mathbf{E}}_{\alpha} = \begin{pmatrix} E_{\alpha\uparrow} & 0 & 0 & 0\\ 0 & -E_{\alpha\downarrow} & 0 & 0\\ 0 & 0 & E_{\alpha\downarrow} & 0\\ 0 & 0 & 0 & -E_{\alpha\uparrow} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{e}, \quad \hat{\mathbf{t}}_{ab} = \begin{pmatrix} t_{ab} & 0 & 0 & 0\\ 0 & -t_{ab}^* & 0 & 0\\ 0 & 0 & t_{ab} & 0\\ 0 & 0 & 0 & -t_{ab}^* \end{pmatrix}$$

onde $\alpha = a, b$.

3.1.3 Hamiltoniano de tunelamento

O Hamiltoniano de tunelamento é dado pela equação (3.1.10) e descreve o tunelamento entre os pontos quânticos e os eletrodos. Os dois primeiros termos descrevem o tunelamento entre o ponto quântico a e os ferromagnetos F_1 e F_2 com amplitude t_1 e t_2 , respectivamente. O terceiro termo descreve o tunelamento entre o ponto quântico b e o supercondutor com amplitude t_s .

$$\hat{H}_T = \sum_{k\sigma} [t_1 a_{k\sigma}^{\dagger} c_{a\sigma} + \text{H.c.}] + \sum_{k\sigma} [t_2 b_{k\sigma}^{\dagger} c_{a\sigma} + \text{H.c.}] + \sum_{p\sigma} [t_s s_{p\sigma}^{\dagger} c_{b\sigma} + \text{H.c.}]$$
(3.1.10)

Assim como nos demais termos, este Hamiltoniano deve ser expresso na representação de Nambu. Nesta notação (3.1.10) pode ser escrito da seguinte forma,

$$\hat{H}_{T} = \sum_{k} [\hat{\Phi}_{1k}^{\dagger} \hat{\mathbf{t}}_{1} \hat{\Psi}_{a} + \text{H.c.}] + \sum_{k} [\hat{\Phi}_{2k}^{\dagger} \hat{\mathbf{t}}_{2} \hat{\Psi}_{a} + \text{H.c.}] + \sum_{p} [\hat{\Phi}_{sp}^{\dagger} \hat{\mathbf{t}}_{s} \hat{\Psi}_{a} + \text{H.c.}].$$
(3.1.11)

onde $\hat{\Phi}_{1k} = (\hat{a}_{k\uparrow}^{\dagger} \ \hat{a}_{k\downarrow} \ \hat{a}_{k\downarrow}^{\dagger} \ \hat{a}_{k\uparrow})^{\dagger}$, é o spinor para o ferromagneto 1, $\hat{\Phi}_{2k} = (\hat{b}_{k\uparrow}^{\dagger} \ \hat{b}_{k\downarrow} \ \hat{b}_{k\downarrow}^{\dagger} \ \hat{b}_{k\uparrow})^{\dagger}$, é o spinor do ferromagneto 2 e $\hat{\Phi}_{sk} = (\hat{s}_{k\uparrow}^{\dagger} \ \hat{s}_{k\downarrow} \ \hat{s}_{k\downarrow}^{\dagger} \ \hat{s}_{k\uparrow})^{\dagger}$, é o spinor do eletrodo supercondutor.

As matrizes de tunelamento têm a seguinte forma,

$$\hat{\mathbf{t}}_{\beta} = \begin{pmatrix} t_{\beta} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -t_{\beta}^{*} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & t_{\beta} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -t_{\beta}^{*} \end{pmatrix}$$

onde $\beta = 1, 2, s$.

Através das equações (3.1.5), (3.1.6), (3.1.9) e (3.1.11) o Hamiltoniano geral para o sistema $(F_1, F_2) - QD_a - QD_b - S$, pode ser escrito da seguinte forma,

$$\hat{H} = \sum_{k} \hat{\Phi}_{1k}^{\dagger} \hat{\mathbf{E}}_{F,k}(0) \hat{\Phi}_{1k} + \sum_{k} \hat{\Phi}_{2k}^{\dagger} \hat{\mathbf{E}}_{F,k}(\theta) \hat{\Phi}_{2k} + \sum_{k} \hat{\Phi}_{sk}^{\dagger} \hat{\mathbf{E}}_{S,k} \hat{\Phi}_{sk} + \hat{\Psi}_{a}^{\dagger} \hat{\mathbf{E}}_{a} \hat{\Psi}_{a} + \hat{\Psi}_{b}^{\dagger} \hat{\mathbf{E}}_{b} \hat{\Psi}_{b} + \hat{\Psi}_{a}^{\dagger} \hat{\mathbf{t}}_{ab} \hat{\Psi}_{b} + \hat{\Psi}_{b}^{\dagger} \hat{\mathbf{t}}_{ab}^{\dagger} \hat{\Psi}_{a} + \sum_{k} [\hat{\Phi}_{1k}^{\dagger} \hat{\mathbf{t}}_{1} \hat{\Psi}_{a} + \text{H.c.}] + \sum_{k} [\hat{\Phi}_{2k}^{\dagger} \hat{\mathbf{t}}_{2} \hat{\Psi}_{a} + \text{H.c.}] + \sum_{k} [\hat{\Phi}_{k}^{\dagger} \hat{\mathbf{t}}_{s} \hat{\Psi}_{a} + \text{H.c.}].$$

$$(3.1.12)$$

Para determinar as propriedades de transporte do sistema $(F_1, F_2) - QD_a - QD_b - S$ será aplicado o formalismo de Keldysh desenvolvido no capítulo anterior, ou seja, serão determinadas as funções de Green correspondentes ao Hamiltoniano (3.1.12).

3.2 Funções de Green dos pontos quânticos

A seguir serão determinadas as funções de Green \mathbf{G}^r , $\mathbf{G}^a \in \mathbf{G}^<$ para os pontos quânticos $a \in b$. Estas funções permitem determinar todas as quantidades relevantes para caracterizar as propriedades de transporte. Para tal fim será aplicado o método da equação de movimento que consiste em obter um conjunto de equações diferenciais para \mathbf{G}^r , $\mathbf{G}^a \in \mathbf{G}^<$ a partir da evolução temporal dos operadores de criação e aniquilação que aparecem na definição da função de Green.

3.2.1 Cálculo das funções de Green $\mathbf{G}_{aa}^{r/a}$ e $\mathbf{G}_{bb}^{r/a}$

O cálculo de $\mathbf{G}_{aa}^{r/a}$ e $\mathbf{G}_{bb}^{r/a}$ pode ser realizado através do método de equação de movimento que consiste em construir equações diferenciais para as funções de Green de modo a obter funções de Green de ordem mais alta. Em certo momento é realizado um truncamento deste cálculo e um

conjunto de equações fechadas para as funções de Green é obtido. Este método pode ser aplicado aqui devido à similaridade entre os formalismos de não-equilíbrio com o formalismo de equilíbrio.

Cálculo de \mathbf{G}_{aa}^r

A função de Green do ponto quântico $a,\, \mathbf{G}^r_{aa},$ é definida da seguinte forma,

$$\mathbf{G}_{aa}^{r}(t-t') = -i\vartheta(t-t') \times \\
\times \begin{pmatrix} \langle \{\hat{c}_{a\uparrow}(t), \hat{c}_{a\uparrow}^{\dagger}(t')\} \rangle & \langle \{\hat{c}_{a\uparrow}(t), \hat{c}_{a\downarrow}(t')\} \rangle & \langle \{\hat{c}_{a\uparrow}(t), \hat{c}_{a\downarrow}^{\dagger}(t')\} \rangle & \langle \{\hat{c}_{a\uparrow}(t), \hat{c}_{a\uparrow}^{\dagger}(t')\} \rangle & \langle \{\hat{c}_{a\downarrow}(t), \hat{c}_{a\downarrow}(t')\} \rangle \\
\langle \{\hat{c}_{a\downarrow}^{\dagger}(t), \hat{c}_{a\uparrow}^{\dagger}(t')\} \rangle & \langle \{\hat{c}_{a\downarrow}^{\dagger}(t), \hat{c}_{a\downarrow}(t')\} \rangle & \langle \{\hat{c}_{a\downarrow}^{\dagger}(t), \hat{c}_{a\downarrow}^{\dagger}(t')\} \rangle & \langle \{\hat{c}_{a\downarrow}(t), \hat{c}_{a\uparrow}(t')\} \rangle \\
\langle \{\hat{c}_{a\downarrow}(t), \hat{c}_{a\uparrow}^{\dagger}(t')\} \rangle & \langle \{\hat{c}_{a\downarrow}(t), \hat{c}_{a\downarrow}(t')\} \rangle & \langle \{\hat{c}_{a\downarrow}(t), \hat{c}_{a\downarrow}(t')\} \rangle & \langle \{\hat{c}_{a\downarrow}(t), \hat{c}_{a\uparrow}(t')\} \rangle \\
\langle \{\hat{c}_{a\uparrow}^{\dagger}(t), \hat{c}_{a\uparrow}^{\dagger}(t')\} \rangle & \langle \{\hat{c}_{a\uparrow}^{\dagger}(t), \hat{c}_{a\downarrow}(t')\} \rangle & \langle \{\hat{c}_{a\uparrow}^{\dagger}(t), \hat{c}_{a\uparrow}(t')\} \rangle & \langle \{\hat{c}_{a\uparrow}^{\dagger}(t), \hat{c}_{a\uparrow}(t')\} \rangle \end{pmatrix}$$
(3.2.1)

A evolução temporal dos operadores de criação e aniquilação é obtida via equação de Heisenberg. Para o operador $\hat{c}^{\dagger}_{a\sigma}(t')$ a equação de evolução temporal é dada por,

$$i\partial_{t'}c^{\dagger}_{a\sigma}(t') = -E_{a\sigma}c^{\dagger}_{a\sigma}(t') - \sum_{k} t_1 a^{\dagger}_{k\sigma}(t') - \sum_{k} t_2 b^{\dagger}_{k\sigma}(t') - t_{ab}c^{\dagger}_{b\sigma}(t').$$
(3.2.2)

Para o primeiro elemento de matriz de (3.2.1), segue que,

$$-i\partial_{t'}G^{r}_{aa,11}(t-t') = \delta(t-t')\langle\{\hat{c}_{a\uparrow}(t),\hat{c}^{\dagger}_{a\uparrow}(t')\}\rangle - i\vartheta(t-t')\langle\{\hat{c}_{a\uparrow}(t),[-i\partial_{t'}\hat{c}^{\dagger}_{a\uparrow}(t')]\}\rangle$$

desde que o primeiro termo é não nulo apenas para t = t' então o anti-comutador é definido e igual a 1. Assim, tem-se que,

$$-i\partial_{t'}G^{r}_{aa,11}(t-t') = \delta(t-t') - E_{a\uparrow}i\vartheta(t-t')\langle\{\hat{c}_{a\uparrow}(t), c^{\dagger}_{a\uparrow}(t')\}\rangle - \sum_{k} t_{1}i\vartheta(t-t')\langle\{\hat{c}_{a\uparrow}(t), a^{\dagger}_{k\uparrow}(t')\}\rangle - \sum_{k} t_{2}i\vartheta(t-t')\langle\{\hat{c}_{a\uparrow}(t), b^{\dagger}_{k\uparrow}(t')\}\rangle - t_{ab}i\vartheta(t-t')\langle\{\hat{c}_{a\uparrow}(t), c^{\dagger}_{b\uparrow}(t')\}\rangle$$

e usando as definições,

$$G^{r}_{a1k,11}(t-t') = -i\vartheta(t-t')\langle\{\hat{c}_{a\uparrow}(t), a^{\dagger}_{k\uparrow}(t')\}\rangle$$

$$G^{r}_{a2k,11}(t-t') = -i\vartheta(t-t')\langle\{\hat{c}_{a\uparrow}(t), b^{\dagger}_{k\uparrow}(t')\}\rangle$$

$$G^{r}_{ab,11}(t-t') = -i\vartheta(t-t')\langle\{\hat{c}_{a\uparrow}(t), c^{\dagger}_{b\uparrow}(t')\}\rangle$$

pode-se escrever ainda,

$$-i\partial_{t'}G^{r}_{aa,11}(t-t') = \delta(t-t') + E_{a\uparrow}G^{r}_{aa,11}(t-t') + \sum_{k} t_{1}G^{r}_{a1k,11}(t-t') + \sum_{k} t_{2}G^{r}_{a2k,11}(t-t') + t_{ab}G^{r}_{ab,11}(t-t')$$

e tomando a transformada de Fourier pode-se escrever ainda,

$$[\omega - E_{a\uparrow}]G^{r}_{aa,11}(\omega) = 1 + \sum_{k} t_1 G^{r}_{a1k,11}(\omega) + \sum_{k} t_2 G^{r}_{a2k,11}(\omega) + t_{ab} G^{r}_{ab,11}(\omega)$$

Esta equação permite escrever o elemento de matriz $G^r_{aa,11}(\omega)$ em termos de outras funções de Green. Um procedimento similar pode ser aplicado para os outros 15 elementos de matriz de \mathbf{G}^r_{aa} . Após alguma álgebra, pode ser obtida a seguinte equação matricial para \mathbf{G}^r_{aa} :

$$\begin{pmatrix} G_{aa,11}^{r} & G_{aa,12}^{r} & G_{aa,13}^{r} & G_{aa,14}^{r} \\ G_{aa,21}^{r} & G_{aa,22}^{r} & G_{aa,23}^{r} & G_{aa,24}^{r} \\ G_{aa,31}^{r} & G_{aa,32}^{r} & G_{aa,33}^{r} & G_{aa,34}^{r} \\ G_{aa,41}^{r} & G_{aa,42}^{r} & G_{aa,43}^{r} & G_{aa,44}^{r} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \omega - E_{a\uparrow} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \omega + E_{a\downarrow} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \omega - E_{a\downarrow} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \omega + E_{a\uparrow} \end{pmatrix} \\ = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} + \\ \\ \begin{pmatrix} G_{a1,k/11}^{r} & G_{a1,k/12}^{r} & G_{a1,k/13}^{r} & G_{a1,k/14}^{r} \\ G_{a1,k/21}^{r} & G_{a1,k/22}^{r} & G_{a1,k/23}^{r} & G_{a1,k/24}^{r} \\ G_{a1,k/31}^{r} & G_{a1,k/32}^{r} & G_{a1,k/33}^{r} & G_{a1,k/34}^{r} \\ G_{a1,k/41}^{r} & G_{a1,k/42}^{r} & G_{a1,k/43}^{r} & G_{a1,k/44}^{r} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} t_{1} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -t_{1}^{*} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & t_{1} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -t_{1}^{*} \end{pmatrix} + \\ \\ \begin{pmatrix} G_{a2,k/11}^{r} & G_{a2,k/22}^{r} & G_{a2,k/33}^{r} & G_{a2,k/34}^{r} \\ G_{a2,k/31}^{r} & G_{a2,k/32}^{r} & G_{a2,k/33}^{r} & G_{a2,k/34}^{r} \\ G_{a2,k/41}^{r} & G_{a2,k/44}^{r} & G_{a2,k/44}^{r} & G_{a2,k/44}^{r} \end{pmatrix} \\ \\ \times \begin{pmatrix} t_{2} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -t_{2}^{*} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & t_{2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -t_{2}^{*} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} G_{ba,11}^{r} & G_{ba,22}^{r} & G_{ba,33}^{r} & G_{ba,34}^{r} \\ G_{ba,31}^{r} & G_{ba,34}^{r} & G_{ba,34}^{r} \\ G_{ba,41}^{r} & G_{ba,42}^{r} & G_{ba,34}^{r} & G_{ba,44}^{r} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} t_{ab} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -t_{ab}^{*} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -t_{ab}^{*} \end{pmatrix} \end{pmatrix}$$

e usando uma notação mais compacta, pode-se escrever ainda:

$$\mathbf{G}_{aa}^{r}(\omega)[\omega\mathbf{I} - \mathbf{H}_{qda}] = \mathbf{1} + \sum_{k} \mathbf{G}_{a1k}^{r}(\omega)\mathbf{t}_{1} + \sum_{k} \mathbf{G}_{a2k}^{r}(\omega)\mathbf{t}_{2} + \mathbf{G}_{ab}^{r}(\omega)\mathbf{t}_{ab}, \qquad (3.2.3)$$

e usando a equação (D.1.7) do apêndice D, fazendo $\alpha = \gamma = a$ e $\beta = 1$ ou 2, pode-se reescrever as funções de Green mistas \mathbf{G}_{a1k}^r e \mathbf{G}_{a2k}^r da seguinte forma,

$$\begin{aligned} \mathbf{G}_{a1k}^{r}(\omega) &= \mathbf{G}_{aa}^{r}(\omega) \mathbf{\hat{t}}_{1}^{\dagger} \mathbf{g}_{1k}^{r}(\omega) \\ \mathbf{G}_{a2k}^{r}(\omega) &= \mathbf{G}_{aa}^{r}(\omega) \mathbf{\hat{t}}_{2}^{\dagger} \mathbf{g}_{2k}^{r}(\omega) \end{aligned}$$

Na equação acima $\mathbf{g}_{1k}^r(\omega)$ e $\mathbf{g}_{2k}^r(\omega)$ são as funções de Green dos eletrodos ferromagnéticos isolados dos pontos quânticos. Estas funções de Green são discutidas em detalhes no apêndice B. Substituindo-se \mathbf{G}_{a1k}^r e \mathbf{G}_{a2k}^r em (3.2.3), segue que,

$$\mathbf{G}_{aa}^{r}(\omega)[\omega\mathbf{I} - \mathbf{H}_{qda}] = \mathbf{1} + \mathbf{G}_{aa}^{r}(\omega)\sum_{k} \mathbf{\hat{t}}_{1}^{\dagger}\mathbf{g}_{1k}^{r}(\omega)\mathbf{t}_{1} + \mathbf{G}_{aa}^{r}(\omega)\sum_{k} \mathbf{\hat{t}}_{2}^{\dagger}\mathbf{g}_{2k}^{r}(\omega)\mathbf{t}_{2} + \mathbf{G}_{ab}^{r}(\omega)\mathbf{t}_{ab}$$

e definindo as auto-energias retardadas dos ferromagnetos 1 e 2 como:

$$\boldsymbol{\Sigma}_{1}^{r}(\omega) = \sum_{k} \mathbf{\hat{t}}_{1}^{\dagger} \mathbf{g}_{1k}^{r}(\omega) \mathbf{t}_{1}$$
(3.2.4)

$$\boldsymbol{\Sigma}_{2}^{r}(\omega) = \sum_{k} \mathbf{\hat{t}}_{2}^{\dagger} \mathbf{g}_{2k}^{r}(\omega) \mathbf{t}_{2}$$
(3.2.5)

pode-se reescrever \mathbf{G}_{aa}^r da seguinte forma,

$$\mathbf{G}_{aa}^{r}(\omega)[\omega\mathbf{I} - \mathbf{H}_{qda} - \boldsymbol{\Sigma}_{L}^{r}(\omega)] = \mathbf{1} + \mathbf{G}_{ab}^{r}(\omega)\mathbf{t}_{ab}$$
(3.2.6)

onde,

$$\boldsymbol{\Sigma}_{L}^{r}(\omega) = \boldsymbol{\Sigma}_{1}^{r}(\omega) + \boldsymbol{\Sigma}_{2}^{r}(\omega)$$

é a auto-energia devido ao acoplamento do ponto quântico a com os eletrodos do lado esquerdo da nanoestrutura que são os dois eletrodos ferromagnéticos.

Aqui é conveniente definir a função de Green retardada do ponto quântico a devido ao acoplamento com os eletrodos ferromagnéticos através do resolvente,

$$\mathbf{G}_{aa}^{r0}(\omega) = [\omega \mathbf{I} - \mathbf{H}_{qda} - \boldsymbol{\Sigma}_{L}^{r}(\omega)]^{-1}.$$
(3.2.7)

Note que \mathbf{G}_{aa}^{r0} leva em conta somente o acoplamento do ponto quântico com os ferromagnetos sem considerar o acoplamento com o ponto quântico b.

Substituindo (3.2.7) em (3.2.6) tem-se que,

$$\mathbf{G}_{aa}^{r}(\omega) = \mathbf{G}_{aa}^{r0}(\omega) + \mathbf{G}_{ab}^{r}(\omega)\mathbf{t}_{ab}\mathbf{G}_{aa}^{r0}(\omega).$$
(3.2.8)

Equação para \mathbf{G}^r_{ab}

A equação para a função de Green retardada para o ponto quântico a, dada por (3.2.8), está definida em termos da função de Green mista dos pontos quânticos $a \in b$. A matriz para a função de Green \mathbf{G}_{ab}^r é dada por,

$$\mathbf{G}_{ab}^{r}(t-t') = -i\vartheta(t-t') \times \left\{ \begin{cases} \hat{c}_{a\uparrow}(t), \hat{c}_{b\uparrow}^{\dagger}(t') \} \rangle & \langle \{\hat{c}_{a\uparrow}(t), \hat{c}_{b\downarrow}(t') \} \rangle & \langle \{\hat{c}_{a\uparrow}(t), \hat{c}_{b\downarrow}^{\dagger}(t') \} \rangle & \langle \{\hat{c}_{a\uparrow}(t), \hat{c}_{b\uparrow}(t') \} \rangle \\ \langle \{\hat{c}_{a\downarrow}^{\dagger}(t), \hat{c}_{b\uparrow}^{\dagger}(t') \} \rangle & \langle \{\hat{c}_{a\downarrow}^{\dagger}(t), \hat{c}_{b\downarrow}(t') \} \rangle & \langle \{\hat{c}_{a\downarrow}^{\dagger}(t), \hat{c}_{b\downarrow}^{\dagger}(t') \} \rangle & \langle \{\hat{c}_{a\downarrow}(t), \hat{c}_{b\downarrow}(t') \} \rangle \\ \langle \{\hat{c}_{a\downarrow}(t), \hat{c}_{b\uparrow}^{\dagger}(t') \} \rangle & \langle \{\hat{c}_{a\downarrow}(t), \hat{c}_{b\downarrow}(t') \} \rangle & \langle \{\hat{c}_{a\downarrow}(t), \hat{c}_{b\downarrow}(t') \} \rangle & \langle \{\hat{c}_{a\downarrow}(t), \hat{c}_{b\uparrow}(t') \} \rangle \\ \langle \{\hat{c}_{a\uparrow}^{\dagger}(t), \hat{c}_{b\uparrow}^{\dagger}(t') \} \rangle & \langle \{\hat{c}_{a\uparrow}^{\dagger}(t), \hat{c}_{b\downarrow}(t') \} \rangle & \langle \{\hat{c}_{a\uparrow}^{\dagger}(t), \hat{c}_{b\uparrow}(t') \} \rangle \\ \langle \{\hat{c}_{a\uparrow}^{\dagger}(t), \hat{c}_{b\uparrow}^{\dagger}(t') \} \rangle & \langle \{\hat{c}_{a\uparrow}^{\dagger}(t), \hat{c}_{b\downarrow}(t') \} \rangle & \langle \{\hat{c}_{a\uparrow}^{\dagger}(t), \hat{c}_{b\uparrow}(t') \} \rangle \\ \end{cases}$$

$$(3.2.9)$$

A exemplo do cálculo de \mathbf{G}_{aa}^r , aqui será mostrado o cálculo do primeiro elemento de matriz, os demais elementos seguem diretamente. A equação de movimento para o operador $\hat{c}_{b\sigma}^{\dagger}$ é escrita da seguinte forma,

$$i\partial_{t'}c^{\dagger}_{b\sigma}(t') = -E_{b\sigma}c^{\dagger}_{b\sigma}(t') - \sum_{k} t_{s}s^{\dagger}_{k\sigma}(t') - t^{*}_{ab}c^{\dagger}_{a\sigma}(t')$$
(3.2.10)

Substituindo este resultado em ${\cal G}^r_{ab,11}$ pode-se escrever,

$$-i\partial_{t'}G^{r}_{ab,11}(t-t') = \delta(t-t')\langle\{\hat{c}_{b\uparrow}(t),\hat{c}^{\dagger}_{a\uparrow}(t')\}\rangle - i\vartheta(t-t')\langle\{\hat{c}_{a\uparrow}(t),-i\partial_{t'}[\hat{c}^{\dagger}_{b\uparrow}(t')]\}\rangle$$

e desde que o primeiro termo é não nulo apenas quando t = t' o anticomutador é definido neste caso. No entanto, operadores de diferentes pontos quânticos anti-comutam, i.e., $\{\hat{c}_{a\uparrow}(t), \hat{c}_{b\uparrow}^{\dagger}(t)\} = 0$ de modo que,

$$-i\partial_{t'}G^{r}_{ab,11}(t-t') = -E_{b\uparrow}i\vartheta(t-t')\langle\{\hat{c}_{a\uparrow}(t),c^{\dagger}_{b\uparrow}(t')\}\rangle -t_{s}i\vartheta(t-t')\sum_{k}\langle\{\hat{c}_{a\uparrow}(t),s^{\dagger}_{k\uparrow}(t')\}\rangle - t^{*}_{ab}i\vartheta(t-t')\langle\{\hat{c}_{a\uparrow}(t),c^{\dagger}_{a\uparrow}(t')\}\rangle$$

e identificando-se os elementos de matriz das funções de Green correspondentes:

$$G^{r}_{ba,11}(t-t') = -i\vartheta(t-t')\langle\{\hat{c}_{a\uparrow}(t), c^{\dagger}_{b\uparrow}(t')\}\rangle$$

$$G^{r}_{as,11}(t-t') = -i\vartheta(t-t')\sum_{k}\langle\{\hat{c}_{a\uparrow}(t), s^{\dagger}_{k\uparrow}(t')\}\rangle$$

$$G^{r}_{aa,11}(t-t') = -i\vartheta(t-t')\langle\{\hat{c}_{a\uparrow}(t), c^{\dagger}_{a\uparrow}(t')\}\rangle$$

segue que,

$$-i\partial_{t'}G^r_{ba,11}(t-t') = E_{b\uparrow}G^r_{ba,11}(t-t') + t_sG^r_{as,11}(t-t') + t^*_{ab}G^r_{aa,11}(t-t')$$

ou ainda,

$$(-i\partial_{t'} - E_{b\uparrow})G^r_{ba,11}(t-t') = t_s G^r_{as,11}(t-t') + t^*_{ab} G^r_{aa,11}(t-t')$$

e tomando a transformada de Fourier, tem-se que,

$$(\omega - E_{b\uparrow})G^{r}_{ba,11}(\omega) = t_{s}G^{r}_{as,11}(\omega) + t^{*}_{ab}G^{r}_{aa,11}(\omega)$$

Os outros elementos de matriz podem ser obtidos de maneira análoga. As 16 equações podem ser combinadas em uma notação matricial da seguinte forma,

$$\mathbf{G}_{ab}^{r}(\omega)[\omega\mathbf{I} - \mathbf{H}_{qdb}] = \mathbf{G}_{as}^{r}(\omega)\mathbf{t}_{s} + \mathbf{G}_{aa}^{r}(\omega)\mathbf{t}_{ab}^{\dagger}$$
(3.2.11)

e usando a equação (D.1.7) do apêndice D, fazendo $\alpha = a, \gamma = b$ e $\beta = s$, pode-se reescrever a função de Green mista \mathbf{G}_{as}^r da seguinte forma,

$$\mathbf{G}_{as}^{r}(\omega) = \mathbf{G}_{ab}^{r}(\omega) \mathbf{\hat{t}}_{s}^{\dagger} \sum_{k} \mathbf{g}_{sk}^{r}(\omega)$$

onde $\mathbf{g}_{sk}^r(\omega)$ é a função de Green do eletrodo supercondutor isolado dos pontos quânticos (ver apêndice B). Substituindo em (3.2.11), segue que,

$$\mathbf{G}_{ab}^{r}(\omega)[\omega\mathbf{I} - \mathbf{H}_{qdb}] = \mathbf{G}_{ab}^{r}(\omega)\mathbf{\hat{t}}_{s}^{\dagger}\sum_{k}\mathbf{g}_{sk}^{r}(\omega)\mathbf{t}_{s} + \mathbf{G}_{aa}^{r}(\omega)\mathbf{t}_{ab}$$
(3.2.12)

e definindo a auto-energia retardada como,

$$\boldsymbol{\Sigma}_{R}^{r} = \sum_{k} \hat{\mathbf{t}}_{s}^{\dagger} \mathbf{g}_{sk}^{r}(\omega) \mathbf{t}_{s}$$
(3.2.13)

pode-se reescrever (3.2.12) na seguinte forma,

$$\begin{aligned} \mathbf{G}_{ab}^{r}(\omega)[\omega\mathbf{I} - \mathbf{H}_{qdb}] &= \mathbf{G}_{ab}^{r}(\omega)\boldsymbol{\Sigma}_{R}^{r} + \mathbf{G}_{aa}^{r}(\omega)\mathbf{t}_{ab}^{\dagger} \\ \mathbf{G}_{ab}^{r}(\omega)[\omega\mathbf{I} - \mathbf{H}_{qdb} - \boldsymbol{\Sigma}_{R}^{r}] &= \mathbf{G}_{aa}^{r}(\omega)\mathbf{t}_{ab}^{\dagger} \end{aligned}$$

e definindo,

$$\mathbf{G}_{bb}^{r0}(\omega) = [\omega \mathbf{I} - \mathbf{H}_{qdb} - \boldsymbol{\Sigma}_{R}^{r}]^{-1}$$
(3.2.14)

segue finalmente,

$$\mathbf{G}_{ab}^{r}(\omega) = \mathbf{G}_{aa}^{r}(\omega) \mathbf{t}_{ab}^{\dagger} \mathbf{G}_{bb}^{r0}(\omega)$$
(3.2.15)

Note que a função de Green retardada \mathbf{G}_{bb}^{r0} leva em conta apenas o acoplamento do ponto quântico b com o supercondutor não sendo considerado o acoplamento com ponto quântico a.

Substituindo (3.2.15) em (3.2.8) segue que,

$$\mathbf{G}_{aa}^{r}(\omega) = \mathbf{G}_{aa}^{r0}(\omega) + \mathbf{G}_{aa}^{r}(\omega)\mathbf{t}_{ab}^{\dagger}\mathbf{G}_{bb}^{r0}(\omega)\mathbf{t}_{ab}\mathbf{G}_{aa}^{r0}(\omega)$$
(3.2.16)

A equação acima é a função de Green retardada para o ponto quântico a. Um cálculo similar pode ser realizado para o ponto quântico b que resulta na seguinte equação,

$$\mathbf{G}_{bb}^{r}(\omega) = \mathbf{G}_{bb}^{r0}(\omega) + \mathbf{G}_{bb}^{r}(\omega)\mathbf{t}_{ab}^{\dagger}\mathbf{G}_{aa}^{r0}(\omega)\mathbf{t}_{ab}\mathbf{G}_{bb}^{r0}(\omega).$$
(3.2.17)

As funções de Green avançadas para os pontos quânticos podem ser obtidas tomando o adjunto de (3.2.16) e (3.2.17) o que permite escrever,

$$\mathbf{G}_{aa}^{a}(\omega) = \mathbf{G}_{aa}^{a0}(\omega) + \mathbf{G}_{aa}^{a0}(\omega)\mathbf{t}_{ab}^{\dagger}\mathbf{G}_{bb}^{a0}(\omega)\mathbf{t}_{ab}\mathbf{G}_{aa}^{a}(\omega)$$
(3.2.18)

para o ponto quântico a. Para o ponto quântico b a função de Green \mathbf{G}^a_{bb} é dada por,

$$\mathbf{G}_{bb}^{a}(\omega) = \mathbf{G}_{bb}^{a0}(\omega) + \mathbf{G}_{bb}^{a0}(\omega)\mathbf{t}_{ab}^{\dagger}\mathbf{G}_{aa}^{a0}(\omega)\mathbf{t}_{ab}\mathbf{G}_{bb}^{a}(\omega).$$
(3.2.19)

É importante observar que as equações (3.2.16) a (3.2.19) determinam $\mathbf{G}_{aa}^{r/a} \in \mathbf{G}_{bb}^{r/a}$ completamente visto que $\mathbf{G}_{aa}^{r/a0} \in \mathbf{G}_{bb}^{r/a0}$ são funções conhecidas. As auto-energias $\boldsymbol{\Sigma}_{L}^{r/a} \in \boldsymbol{\Sigma}_{R}^{r/a}$ e as funções de Green de equilíbrio que permitem obter estas funções de Green estão determinadas no apêndice B.

3.2.2 Cálculo da função de Green $G_{aa}^{<}$

A função de Green de correlação para o ponto quântico a, é definida por,

$$\mathbf{G}_{aa}^{<}(t,t') = i \begin{pmatrix} \langle c_{a\uparrow}^{\dagger}(t')c_{a\uparrow}(t) \rangle & \langle c_{a\downarrow}(t')c_{a\uparrow}(t) \rangle & \langle c_{a\downarrow}^{\dagger}(t')c_{a\uparrow}(t) \rangle & \langle c_{a\uparrow}(t')c_{a\uparrow}(t) \rangle \\ \langle c_{a\uparrow}^{\dagger}(t')c_{a\downarrow}^{\dagger}(t) \rangle & \langle c_{a\downarrow}(t')c_{a\downarrow}^{\dagger}(t) \rangle & \langle c_{a\downarrow}^{\dagger}(t')c_{a\downarrow}^{\dagger}(t) \rangle & \langle c_{a\uparrow}(t')c_{a\downarrow}^{\dagger}(t) \rangle \\ \langle c_{a\uparrow}^{\dagger}(t')c_{a\downarrow}(t) \rangle & \langle c_{a\downarrow}(t')c_{a\downarrow}(t) \rangle & \langle c_{a\downarrow}^{\dagger}(t')c_{a\downarrow}(t) \rangle & \langle c_{a\uparrow}(t')c_{a\downarrow}(t) \rangle \\ \langle c_{a\uparrow}^{\dagger}(t')c_{a\uparrow}^{\dagger}(t) \rangle & \langle c_{a\downarrow}(t')c_{a\uparrow}^{\dagger}(t) \rangle & \langle c_{a\downarrow}^{\dagger}(t')c_{a\uparrow}^{\dagger}(t) \rangle & \langle c_{a\uparrow}(t')c_{a\uparrow}^{\dagger}(t) \rangle \end{pmatrix} \end{cases} .$$
(3.2.20)

A evolução temporal do operador $\hat{c}^{\dagger}_{a\sigma}(t')$ é obtido pela equação de Heisenberg e após alguma álgebra o resultado final é dado abaixo:

$$i\partial_{t'}c^{\dagger}_{a\sigma}(t') = -E_{a\sigma}c^{\dagger}_{a\sigma}(t') - \sum_{k} t_1 a^{\dagger}_{k\sigma}(t') - \sum_{k} t_2 b^{\dagger}_{k\sigma}(t') - t_{ab}c^{\dagger}_{b\sigma}(t').$$
(3.2.21)

Substituindo (3.2.21) no elemento de matriz $G^{<}_{aa,11}(t,t') = i \langle \hat{c}^{\dagger}_{a\uparrow}(t') \hat{c}_{a\uparrow}(t) \rangle$ segue que,

$$-i\partial_{t'}G^{<}_{aa,11}(t,t') = \left\langle \left\{ iE_{a\uparrow}c^{\dagger}_{a\uparrow}(t') + i\sum_{k}t_{1}a^{\dagger}_{k\uparrow}(t') + i\sum_{k}t_{2}b^{\dagger}_{k\uparrow}(t') + it^{*}_{ab}c^{\dagger}_{b\uparrow}(t') \right\}c_{a\uparrow}(t) \right\rangle \quad (3.2.22)$$

e definindo,

$$G_{a1k,11}^{<}(t-t') = i\langle a_{k\uparrow}^{\dagger}(t')c_{a\uparrow}(t)\rangle$$
(3.2.23)

$$G_{a2k,11}^{<}(t-t') = i \langle b_{k\uparrow}^{\dagger}(t') c_{a\uparrow}(t) \rangle$$
(3.2.24)

$$G_{ba,11}^{<}(t-t') = i \langle c_{b\uparrow}^{\dagger}(t') c_{a\uparrow}(t) \rangle$$
(3.2.25)

pode-se reescrever (3.2.22) da seguinte maneira,

$$-i\partial_{t'}G^{<}_{aa,11}(t-t') = E_{a\uparrow}G^{<}_{aa,11}(t-t') + t_1\sum_k G^{<}_{a1,k11}(t-t') + t_2\sum_k G^{<}_{a2,k11}(t-t') + t^*_{ab}G^{<}_{ba,11}(t-t')$$
(3.2.26)

e tomando a transformada de Fourier da equação (3.2.26) segue que,

$$\omega G_{aa,11}^{<}(\omega) = E_{a\uparrow} G_{aa,11}^{<}(\omega) + t_1 \sum_{k} G_{a1,k11}^{<}(\omega) + t_2 \sum_{k} G_{a2,k11}^{<}(\omega) + t_{ab}^* G_{ba,11}^{<}(\omega)$$

ou ainda:

$$\left[\omega - E_{a\uparrow}\right]G_{aa,11}^{<}(\omega) = t_1 \sum_{k} G_{a1,k11}^{<}(\omega) + t_2 \sum_{k} G_{a2,k11}^{<}(\omega) + t_{ab}^* G_{ba,11}^{<}(\omega).$$
(3.2.27)

As outras 15 equações para os demais elementos de matriz de (3.2.20) seguem de maneira análoga a realizada para o elemento $G_{aa,11}^{<}$. Estas 16 equações podem novamente ser agrupadas na forma de um produto matricial dado por,

$$\begin{pmatrix} G_{aa,11}^{<} & G_{aa,12}^{<} & G_{aa,13}^{<} & G_{aa,14}^{<} \\ G_{aa,21}^{<} & G_{aa,22}^{<} & G_{aa,23}^{<} & G_{aa,24}^{<} \\ G_{aa,31}^{<} & G_{aa,32}^{<} & G_{aa,33}^{<} & G_{aa,34}^{<} \\ G_{aa,41}^{<} & G_{aa,42}^{<} & G_{aa,43}^{<} & G_{aa,44}^{<} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \omega - E_{a\uparrow} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \omega + E_{a\downarrow} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \omega - E_{a\downarrow} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \omega + E_{a\uparrow} \end{pmatrix} = \sum_{k} \\ \begin{pmatrix} G_{a1,k/11}^{<} & G_{a1,k/12}^{<} & G_{a1,k/13}^{<} & G_{a1,k/14}^{<} \\ G_{a1,k/21}^{<} & G_{a1,k/22}^{<} & G_{a1,k/23}^{<} & G_{a1,k/24}^{<} \\ G_{a1,k/31}^{<} & G_{a1,k/32}^{<} & G_{a1,k/33}^{<} & G_{a1,k/44}^{<} \\ G_{a1,k/41}^{<} & G_{a1,k/42}^{<} & G_{a1,k/33}^{<} & G_{a1,k/44}^{<} \\ G_{a1,k/41}^{<} & G_{a1,k/42}^{<} & G_{a1,k/33}^{<} & G_{a1,k/44}^{<} \\ \end{pmatrix} \begin{pmatrix} t_1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -t_1^* & 0 & 0 \\ 0 & 0 & t_1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -t_1^* \end{pmatrix} + \sum_{k} \begin{pmatrix} G_{a2,k/11}^{<} & G_{a2,k/12}^{<} & G_{a2,k/33}^{<} & G_{a2,k/34}^{<} \\ G_{a2,k/31}^{<} & G_{a2,k/32}^{<} & G_{a2,k/33}^{<} & G_{a2,k/34}^{<} \\ G_{a2,k/41}^{<} & G_{a2,k/42}^{<} & G_{a2,k/43}^{<} & G_{a2,k/44}^{<} \end{pmatrix} \\ \times \begin{pmatrix} t_2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & t_2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -t_2^* \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} G_{ba,11}^{<} & G_{ba,32}^{<} & G_{ba,33}^{<} & G_{ba,34}^{<} \\ G_{ba,31}^{<} & G_{ba,34}^{<} & G_{ba,34}^{<} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} t_{ab} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -t_{ab}^{*} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & t_{ab} & 0 \\ \end{pmatrix}$$

o que pode ser escrito na forma compacta,

$$\mathbf{G}_{aa}^{<}[\omega\mathbf{I} - \mathbf{H}_{qda}] = \mathbf{G}_{a1}^{<}\mathbf{t}_{1} + \mathbf{G}_{a2}^{<}\mathbf{t}_{2} + \mathbf{G}_{ba}^{<}\mathbf{t}_{ab}.$$
(3.2.28)

Conforme mostrado no apêndice D, as equações para as funções de Green $\mathbf{G}_{a1}^{<}$ e $\mathbf{G}_{a2}^{<}$ apresentam a seguinte forma,

$$\begin{split} \mathbf{G}_{a1}^{<}(\omega) &= \sum_{k} [\mathbf{G}_{aa}^{r}(\omega) \mathbf{\hat{t}}_{1}^{\dagger} \mathbf{g}_{1k}^{<}(\omega) + \mathbf{G}_{aa}^{<}(\omega) \mathbf{\hat{t}}_{1}^{\dagger} \mathbf{g}_{1k}^{a}(\omega)] \\ \mathbf{G}_{a2}^{<}(\omega) &= \sum_{k} [\mathbf{G}_{aa}^{r}(\omega) \mathbf{\hat{t}}_{2}^{\dagger} \mathbf{g}_{2k}^{<}(\omega) + \mathbf{G}_{aa}^{<}(\omega) \mathbf{\hat{t}}_{2}^{\dagger} \mathbf{g}_{2k}^{a}(\omega)] \end{split}$$

e, substituindo estas equações em (3.2.28) segue que,

$$\mathbf{G}_{aa}^{<}[\omega\mathbf{I} - \mathbf{H}_{qda}] = \mathbf{G}_{aa}^{r}(\omega) \sum_{k} \mathbf{\hat{t}}_{1}^{\dagger} \mathbf{g}_{1k}^{<}(\omega) \mathbf{t}_{1} + \mathbf{G}_{aa}^{<}(\omega) \sum_{k} \mathbf{\hat{t}}_{1}^{\dagger} \mathbf{g}_{1k}^{a}(\omega) \mathbf{t}_{1} + \sum_{k} \mathbf{G}_{aa}^{r}(\omega) \sum_{k} \mathbf{\hat{t}}_{2}^{\dagger} \mathbf{g}_{2k}^{<}(\omega) \mathbf{t}_{2} + \mathbf{G}_{aa}^{<}(\omega) \sum_{k} \mathbf{\hat{t}}_{2}^{\dagger} \mathbf{g}_{2k}^{a}(\omega) \mathbf{t}_{2} + \mathbf{G}_{ba}^{<} \mathbf{t}_{ab}. \quad (3.2.29)$$

e definindo,

$$\begin{split} \boldsymbol{\Sigma}_{1}^{a}(\omega) &= \mathbf{t}_{1}^{\dagger} \sum_{k} \mathbf{g}_{1k}^{a}(\omega) \mathbf{t}_{1}, \\ \boldsymbol{\Sigma}_{2}^{a}(\omega) &= \mathbf{t}_{2}^{\dagger} \sum_{k} \mathbf{g}_{2k}^{a}(\omega) \mathbf{t}_{2}, \\ \boldsymbol{\Sigma}_{1}^{<}(\omega) &= \mathbf{t}_{1}^{\dagger} \sum_{k} \mathbf{g}_{1k}^{<}(\omega) \mathbf{t}_{1}, \\ \boldsymbol{\Sigma}_{2}^{<}(\omega) &= \mathbf{t}_{2}^{\dagger} \sum_{k} \mathbf{g}_{2k}^{<}(\omega) \mathbf{t}_{2}, \end{split}$$

pode-se reescrever (3.2.29) da seguinte forma:

$$\mathbf{G}_{aa}^{<}[\omega\mathbf{I} - \mathbf{H}_{qda}] = \mathbf{G}_{aa}^{r}(\omega)\boldsymbol{\Sigma}_{1}^{<}(\omega) + \mathbf{G}_{aa}^{<}(\omega)\boldsymbol{\Sigma}_{1}^{a}(\omega) + \mathbf{G}_{aa}^{r}(\omega)\boldsymbol{\Sigma}_{2}^{<}(\omega) + \mathbf{G}_{aa}^{<}(\omega)\boldsymbol{\Sigma}_{2}^{a}(\omega) + \mathbf{G}_{ba}^{<}\mathbf{t}_{ab}$$

A equação acima pode ser simplificada agrupando os termos similares, pode-se escrever:

$$\mathbf{G}_{aa}^{<}[\omega\mathbf{I} - \mathbf{H}_{qda} - \boldsymbol{\Sigma}_{L}^{a}(\omega)] = \mathbf{G}_{aa}^{r}(\omega)\boldsymbol{\Sigma}_{L}^{<}(\omega) + \mathbf{G}_{ba}^{<}\mathbf{t}_{ab}.$$

onde,

$$\boldsymbol{\Sigma}_{L}^{<}(\omega) = \boldsymbol{\Sigma}_{1}^{<}(\omega) + \boldsymbol{\Sigma}_{2}^{<}(\omega).$$

Definindo a função de Green avançada do ponto quântico a isolado do ponto quântico b pelo resolvente,

$$\mathbf{G}_{aa}^{a0}(\omega) = [\omega \mathbf{I} - \mathbf{H}_{qda} - \boldsymbol{\Sigma}_{L}^{a}(\omega)]^{-1}$$

pode-se reescrever a equação para $\mathbf{G}_{aa}^{<}$ como segue,

$$\mathbf{G}_{aa}^{<} = \mathbf{G}_{aa}^{r}(\omega) \boldsymbol{\Sigma}_{L}^{<}(\omega) \mathbf{G}_{aa}^{a0}(\omega) + \mathbf{G}_{ba}^{<} \mathbf{t}_{ab} \mathbf{G}_{aa}^{a0}(\omega).$$
(3.2.30)

Equação para $\mathbf{G}_{ba}^{<}$

A equação (3.2.30) depende da função de Green $\mathbf{G}_{ba}^{<}$ a qual acopla os pontos quânticos $a \in b$. Dado que $\mathbf{G}_{ba}^{<}$ é definida por (3.2.31), é necessário determinar a evolução temporal de cada elemento de matriz a exemplo do cálculo que foi realizado para obter (3.2.28).

$$\mathbf{G}_{ab}^{<}(t-t') = i \begin{pmatrix} \langle c_{b\uparrow}^{\dagger}(t')c_{a\uparrow}(t) \rangle & \langle c_{b\downarrow}(t')c_{a\uparrow}(t) \rangle & \langle c_{b\downarrow}^{\dagger}(t')c_{a\uparrow}(t) \rangle & \langle c_{b\downarrow}(t')c_{a\uparrow}(t) \rangle & \langle c_{b\downarrow}(t')c_{a\downarrow}(t) \rangle \\ \langle c_{b\uparrow}^{\dagger}(t')c_{a\downarrow}^{\dagger}(t) \rangle & \langle c_{b\downarrow}(t')c_{a\downarrow}^{\dagger}(t) \rangle & \langle c_{b\downarrow}^{\dagger}(t')c_{a\downarrow}^{\dagger}(t) \rangle & \langle c_{b\downarrow}(t')c_{a\downarrow}^{\dagger}(t) \rangle \\ \langle c_{b\uparrow}^{\dagger}(t')c_{a\downarrow}(t) \rangle & \langle c_{b\downarrow}(t')c_{a\downarrow}(t) \rangle & \langle c_{b\downarrow}^{\dagger}(t')c_{a\downarrow}(t) \rangle & \langle c_{b\uparrow}(t')c_{a\downarrow}(t) \rangle \\ \langle c_{b\uparrow}^{\dagger}(t')c_{a\uparrow}^{\dagger}(t) \rangle & \langle c_{b\downarrow}(t')c_{a\uparrow}^{\dagger}(t) \rangle & \langle c_{b\downarrow}^{\dagger}(t')c_{a\uparrow}^{\dagger}(t) \rangle & \langle c_{b\downarrow}(t')c_{a\uparrow}^{\dagger}(t) \rangle & \langle c_{b\downarrow}(t')c_{a\downarrow}^{\dagger}(t) \rangle & \langle c_{b\downarrow}(t')$$

Novamente é necessário obter as equações de movimento para cada elemento de matriz da equação (3.2.31). Desta forma, tomando como exemplo o primeiro elemento de matriz, tem-se que,

$$-i\partial_{t'}G^{<}_{ab,11}(t-t') = \langle \partial_{t'}[c^{\dagger}_{b\uparrow}(t')]c_{a\uparrow}(t) \rangle$$

e usando (3.2.10), i.e,

$$i\partial_{t'}c^{\dagger}_{b\sigma}(t') = -E_{b\sigma}c^{\dagger}_{b\sigma}(t') - \sum_{k} t_{s}s^{\dagger}_{k\sigma}(t') - t^{*}_{ab}c^{\dagger}_{a\sigma}(t')$$

e substituindo na equação para $G^<_{ab,11}$ segue que,

$$-i\partial_{t'}G^{<}_{ab,11}(t-t') = E_{b\uparrow}i\langle c^{\dagger}_{b\uparrow}(t')c_{a\uparrow}(t)\rangle + \sum_{k}t_{s}i\langle s^{\dagger}_{k\uparrow}(t')c_{a\uparrow}(t)\rangle + t^{*}_{ab}i\langle c^{\dagger}_{a\uparrow}(t')c_{a\uparrow}(t)\rangle$$

e identificando os elementos de matriz dados por,

$$G_{as,11}^{<}(t-t') = i \sum_{k} \langle s_{k\uparrow}^{\dagger}(t')c_{a\uparrow}(t) \rangle$$
$$G_{aa,11}^{<}(t-t') = i \langle c_{a\uparrow}^{\dagger}(t')c_{a\uparrow}(t) \rangle$$

pode-se reescrever a equação para $G^{<}_{ab,11}(t-t^{\prime})$ da seguinte forma,

$$-i\partial_{t'}G^{<}_{ab,11}(t-t') = E_{b\uparrow}G^{<}_{ab,11}(t-t') + \sum_{k} t_s G^{<}_{as,11}(t-t') + t^*_{ab}G^{<}_{aa,11}(t-t')$$

tomando a transformada de Fourier, tem-se ainda,

$$[\omega - E_{b\uparrow}]G^{<}_{ab,11}(\omega) = t_s G^{<}_{as,11}(\omega) + t^*_{ab} G^{<}_{aa,11}(\omega)$$

Aplicando o mesmo procedimento para as 15 componentes restantes, pode-se escrever a seguinte equação matricial,

$$\mathbf{G}_{ab}^{<}(\omega)[\omega\mathbf{I} - \mathbf{H}_{qdb}] = \mathbf{G}_{as}^{<}(\omega)\mathbf{t}_{s} + \mathbf{G}_{aa}^{<}(\omega)\mathbf{t}_{ab}^{\dagger}$$
(3.2.32)

A função de Green $\mathbf{G}_{as}^{<}$ pode-ser obtida a partir da continuação analítica de \mathbf{G}_{as}^{t} conforme mostrado no apêndice D, equação (D.1.4). Desta forma, tem-se que,

$$\mathbf{G}_{as}^{<} = \sum_{k} [\mathbf{G}_{ab}^{r} \hat{\mathbf{t}}_{s}^{\dagger} \mathbf{g}_{sk}^{<} + \mathbf{G}_{ab}^{<} \hat{\mathbf{t}}_{s}^{\dagger} \mathbf{g}_{sk}^{a}]$$
(3.2.33)

Substituindo (3.2.33) em (3.2.34) segue que,

$$\mathbf{G}_{ab}^{<}[\omega\mathbf{I} - \mathbf{H}_{qdb}] = \sum_{k} [\mathbf{G}_{ab}^{r} \mathbf{\hat{t}}_{s}^{\dagger} \mathbf{g}_{sk}^{<} \mathbf{t}_{s} + \mathbf{G}_{ab}^{<} \mathbf{\hat{t}}_{s}^{\dagger} \mathbf{g}_{sk}^{a} \mathbf{t}_{s}] + \mathbf{G}_{aa}^{<} \mathbf{t}_{ab}^{\dagger}$$
(3.2.34)

Aqui define-se as seguinte auto-energias,

$$\boldsymbol{\Sigma}_{R}^{<} = \hat{\mathbf{t}}_{s}^{\dagger} \sum_{k} \mathbf{g}_{sk}^{<} \mathbf{t}_{s}$$
(3.2.35)

$$\boldsymbol{\Sigma}_{R}^{a} = \hat{\mathbf{t}}_{s}^{\dagger} \sum_{k} \mathbf{g}_{sk}^{a} \mathbf{t}_{s}$$
(3.2.36)

o que permite reescrever (3.2.34) da seguinte forma:

$$\mathbf{G}_{ab}^{<}[\omega\mathbf{I} - \mathbf{H}_{qdb}] = \mathbf{G}_{ab}^{r}\boldsymbol{\Sigma}_{R}^{<} + \mathbf{G}_{ab}^{<}\boldsymbol{\Sigma}_{R}^{a} + \mathbf{G}_{aa}^{<}\mathbf{t}_{ab}^{\dagger}$$

ou ainda,

$$\mathbf{G}^{<}_{ab}[\omega\mathbf{I}-\mathbf{H}_{qdb}-\boldsymbol{\Sigma}^{a}_{R}]=\mathbf{G}^{r}_{ab}\boldsymbol{\Sigma}^{<}_{R}+\mathbf{G}^{<}_{aa}\mathbf{t}^{\dagger}_{ab}$$

e identificando,

$$\mathbf{G}_{bb}^{r0} = [\omega \mathbf{I} - \mathbf{H}_{qdb} - \boldsymbol{\Sigma}_{R}^{a}]^{-1}$$

pode-se escrever $\mathbf{G}_{ab}^{<}$ na forma final:

$$\mathbf{G}_{ab}^{<} = \mathbf{G}_{ab}^{r} \boldsymbol{\Sigma}_{R}^{<} \mathbf{G}_{bb}^{r0} + \mathbf{G}_{aa}^{<} \mathbf{t}_{ab}^{\dagger} \mathbf{G}_{bb}^{r0}$$
(3.2.37)

É possível eliminar a função de Green $\mathbf{G}_{ab}^<$ combinando as equações (3.2.30) e (3.2.37) da seguinte forma,

$$\mathbf{G}_{aa}^{<} = \mathbf{G}_{aa}^{r} \boldsymbol{\Sigma}_{L}^{<} \mathbf{G}_{aa}^{a0} + \left[\mathbf{G}_{ab}^{r} \boldsymbol{\Sigma}_{R}^{<} \mathbf{G}_{bb}^{r0} + \mathbf{G}_{aa}^{<} \mathbf{t}_{ab}^{\dagger} \mathbf{G}_{bb}^{r0}\right] \mathbf{t}_{ab} \mathbf{G}_{aa}^{a0}$$
$$\mathbf{G}_{aa}^{<} = \mathbf{G}_{aa}^{r} \boldsymbol{\Sigma}_{L}^{<} \mathbf{G}_{aa}^{a0} + \mathbf{G}_{ab}^{r} \boldsymbol{\Sigma}_{R}^{<} \mathbf{G}_{bb}^{r0} \mathbf{t}_{ab} \mathbf{G}_{aa}^{a0} + \mathbf{G}_{aa}^{<} \mathbf{t}_{ab}^{\dagger} \mathbf{G}_{bb}^{r0} \mathbf{t}_{ab} \mathbf{G}_{aa}^{a0}$$

isolando os termos contendo $\mathbf{G}_{aa}^{<}$ segue que,

$$\mathbf{G}_{aa}^{<}\left[[\mathbf{G}_{aa}^{a0}]^{-1} - \mathbf{t}_{ab}^{\dagger}\mathbf{G}_{bb}^{r0}\mathbf{t}_{ab}\right] = \mathbf{G}_{aa}^{r}\boldsymbol{\Sigma}_{L}^{<} + \mathbf{G}_{ab}^{r}\boldsymbol{\Sigma}_{R}^{<}\mathbf{G}_{bb}^{r0}\mathbf{t}_{ab}$$

$$\mathbf{G}_{aa}^{<} = \left[\mathbf{G}_{aa}^{r} \boldsymbol{\Sigma}_{L}^{<} + \mathbf{G}_{ab}^{r} \boldsymbol{\Sigma}_{R}^{<} \mathbf{G}_{bb}^{r0} \mathbf{t}_{ab}\right] \left[[\mathbf{G}_{aa}^{a0}]^{-1} - \mathbf{t}_{ab}^{\dagger} \mathbf{G}_{bb}^{r0} \mathbf{t}_{ab} \right]^{-1}$$

Pela equação (3.2.18), nota-se que o segundo termo entre colchetes é a função de Green avançada do ponto quântico *a*, assim, como:

$$\mathbf{G}^{a}_{aa} = \left[[\mathbf{G}^{a0}_{aa}]^{-1} - \mathbf{t}^{\dagger}_{ab} \mathbf{G}^{r0}_{bb} \mathbf{t}_{ab} \right]^{-1},$$

 $\mathbf{G}_{aa}^{<}$ pode ser escrita da seguinte forma:

$$\mathbf{G}_{aa}^{<} = \mathbf{G}_{aa}^{r} \boldsymbol{\Sigma}_{L}^{<} \mathbf{G}_{aa}^{a} + \mathbf{G}_{ab}^{r} \boldsymbol{\Sigma}_{R}^{<} \mathbf{G}_{bb}^{r0} \cdot \mathbf{t}_{ab} \mathbf{G}_{aa}^{a}$$

Substituindo (3.2.15), tem-se ainda,

$$\mathbf{G}_{aa}^{<} = \mathbf{G}_{aa}^{r} \boldsymbol{\Sigma}_{L}^{<} \mathbf{G}_{aa}^{a} + \mathbf{G}_{aa}^{r} \mathbf{t}_{ab}^{\dagger} \mathbf{G}_{bb}^{r0} \boldsymbol{\Sigma}_{R}^{<} \mathbf{G}_{bb}^{r0} \mathbf{t}_{ab} \mathbf{G}_{aa}^{a}$$
(3.2.38)

A equação (3.2.39) tem a forma da equação de Keldysh como pode ser observado colocando as funções de Green \mathbf{G}_{aa}^r e \mathbf{G}_{aa}^a em evidência:

$$\mathbf{G}_{aa}^{<} = \mathbf{G}_{aa}^{r} \left(\mathbf{\Sigma}_{L}^{<} + \mathbf{t}_{ab}^{\dagger} \mathbf{G}_{bb}^{r0} \mathbf{\Sigma}_{R}^{<} \mathbf{G}_{bb}^{r0} \mathbf{t}_{ab} \right) \mathbf{G}_{aa}^{a}$$
(3.2.39)

Definindo $\Sigma_{Ta}^{<} \equiv \Sigma_{L}^{<} + \mathbf{t}_{ab}^{\dagger} \mathbf{G}_{bb}^{r0} \Sigma_{R}^{<} \mathbf{G}_{bb}^{r0} \mathbf{t}_{ab}$ então pode-se reescrever (3.2.39) na seguinte forma,

$$\mathbf{G}_{aa}^{<} = \mathbf{G}_{aa}^{r} \boldsymbol{\Sigma}_{Ta}^{<} \mathbf{G}_{aa}^{a}$$

$$\boldsymbol{\Sigma}_{Ta}^{<} = \boldsymbol{\Sigma}_{L}^{<} + \mathbf{t}_{ab}^{\dagger} \mathbf{G}_{bb}^{r0} \boldsymbol{\Sigma}_{R}^{<} \mathbf{G}_{bb}^{r0} \mathbf{t}_{ab}$$
(3.2.40)

Um cálculo análogo pode ser desenvolvido para $\mathbf{G}_{bb}^{<}$. No entanto, aqui apenas apresentamos o resultado final,

$$\mathbf{G}_{bb}^{<} = \mathbf{G}_{bb}^{r} \boldsymbol{\Sigma}_{Tb}^{<} \mathbf{G}_{bb}^{a}$$

$$\mathbf{\Sigma}_{Tb}^{<} = \boldsymbol{\Sigma}_{R}^{<} + \mathbf{t}_{ab}^{\dagger} \mathbf{G}_{aa}^{r0} \boldsymbol{\Sigma}_{L}^{<} \mathbf{G}_{aa}^{r0} \mathbf{t}_{ab}$$
(3.2.41)

que também pode ser obtido trocando os índices a por $b \in L$ por R na equação (3.2.40).

As equações (3.2.40) e (3.2.41) juntamente com as equações (3.2.16), (3.2.17), (3.2.18) e (3.2.19) são os resultados básicos deste trabalho. Através destas funções de Green é possível determinar todas as propriedades de transporte do sistema $(F_1, F_2) - QD_a - QD_b - S$. Vale notar que as equações (3.2.40) e (3.2.41) apresentam uma estrutura bastante simples e intuitiva dentro da aproximação de campo médio: o ponto quântico a (b) está conectado diretamente com os eletrodos do lado esquerdo (direito), o que é representado por $\Sigma_L^< (\Sigma_R^<)$, e o acoplamento com o lado direito (esquerdo) é renormalizado pelo acoplamento com o outro ponto quântico. Isto sugere que dentro desta aproximação o sistema como um todo funciona como se fosse composto por um ponto quântico acoplado a dois eletrodos, sendo um deles um eletrodo efetivo composto de um ponto quântico mais um eletrodo.

3.3 Cálculo das quantidades físicas

Desde que as funções de Green estão completamente determinadas, o próximo passo é determinar as quantidades físicas através destas funções. A seguir serão determinadas as expressões para a corrente elétrica, ocupação nos pontos quânticos e a densidade local de estados. Estas quantidades permitem caracterizar o transporte através do sistema $(F_1, F_2) - QD_a - QD_b - S$.

3.3.1 Cálculo da corrente elétrica

Nesta seção serão determinadas as expressões para a corrente elétrica através do sistema (F_1, F_2) – $QD_a - QD_b - S$. Conforme mostrado na figura 3.1, os eletrodos ferromagnéticos estão submetidos a potenciais $V_1 \in V_2$ enquanto que o supercondutor é mantido aterrado. Desta forma, a corrente total I, que é injetada no supercondutor é dada pela soma das correntes $I_1 \in I_2$ oriundas dos ferromagnetos 1 e 2, respectivamente. A seguir, as correntes $I_1 \in I_2$ serão calculadas individualmente e no final a corrente total será obtida usando $I = I_1 + I_2$.

Corrente elétrica entre o ferromagneto 1 e o ponto quântico a

A corrente entre o eletrodo 1 e o ponto quântico a é definida pela taxa de variação do número de elétrons no eletrodo ferromagnético, i.e.,

$$I_1 = -e \langle \hat{N}_1 \rangle$$

onde \hat{N}_1 é a derivada temporal do operador número do eletrodo ferromagnético. A derivada é obtida através da equação de Heisenberg,

$$I_1 = -\frac{ie}{\hbar} \langle [\hat{H}, \hat{N}_1] \rangle$$

desde que \hat{N}_1 comuta com os demais operadores dos eletrodos. Somente os comutadores $[\hat{H}_1, \hat{N}_1]$ e $\langle [\hat{H}_T, \hat{N}_1]$ são diferentes de zero. Desta forma, a equação de Heinsenberg é reduzida a,

$$I_1 = -\frac{ie}{\hbar} \langle [\hat{H}_1, \hat{N}_1] \rangle - \frac{ie}{\hbar} \langle [\hat{H}_T, \hat{N}_1] \rangle$$

Os comutadores são calculados conforme mostrado a seguir:

$$[\hat{H}_1, \hat{N}_1] = \sum_{kp,\sigma\sigma'} \epsilon_{k\sigma} [a_{k\sigma}^{\dagger} a_{k\sigma}, a_{p\sigma'}^{\dagger} a_{p\sigma'}] = \sum_{kp,\sigma\sigma'} \epsilon_{k\sigma} [n_{k\sigma}, n_{p\sigma'}] = 0$$

desde que o comutador entre dois operadores número é zero independentemente de seus índices serem iguais ou diferentes. Agora o próximo comutador a ser determinado é entre o operador número e o Hamiltoniano de tunelamento:

$$[\hat{H}_T, \hat{N}_1] = \sum_{kp,\sigma\sigma'} t_1[a_{k\sigma}^{\dagger}c_{a\sigma}, a_{p\sigma'}^{\dagger}a_{p\sigma'}] + \sum_{kp,\sigma\sigma'} t_1^*[c_{a\sigma}^{\dagger}a_{k\sigma}, a_{p\sigma'}^{\dagger}a_{p\sigma'}]$$

para resolver estas expressões, é necessário utilizar a identidade:

$$[AB, C] = A[B, C] + [A, C]B$$

Com isso, segue que,

$$\begin{split} & [\hat{H}_{T}, \hat{N}_{1}] \\ &= \sum_{kp,\sigma\sigma'} \left\{ t_{1} a_{k\sigma}^{\dagger} [c_{a\sigma}, a_{p\sigma'}^{\dagger} a_{p\sigma'}] + t_{1} [a_{k\sigma}^{\dagger}, a_{p\sigma'}^{\dagger} a_{p\sigma'}] c_{a\sigma} + t_{1}^{*} c_{a\sigma}^{\dagger} [a_{k\sigma}, a_{p\sigma'}^{\dagger} a_{p\sigma'}] + t_{1}^{*} [c_{a\sigma}^{\dagger}, a_{p\sigma'}^{\dagger} a_{p\sigma'}] a_{k\sigma} \right\} \\ &= \sum_{kp,\sigma\sigma'} \left\{ t_{1} [a_{k\sigma}^{\dagger}, a_{p\sigma'}^{\dagger} a_{p\sigma'}] c_{a\sigma} + t_{1}^{*} c_{a\sigma}^{\dagger} [a_{k\sigma}, a_{p\sigma'}^{\dagger} a_{p\sigma'}] \right\} \end{split}$$

onde foi considerado o fato de que o comutador envolvendo o operador do ponto quântico ser nulo pela relação de anti-comutação. Os comutadores restantes podem ser decompostos usando a seguinte identidade:

$$[A, BC] = \{A, B\}C - B\{A, C\}$$

$$[\hat{H}_T, \hat{N}_1] = \sum_{kp,\sigma\sigma'} \left\{ t_1 \left(\{a_{k\sigma}^{\dagger}, a_{p\sigma'}^{\dagger}\}a_{p\sigma'} - a_{p\sigma'}^{\dagger}\{a_{k\sigma}^{\dagger}, a_{p\sigma'}\} \right) c_{a\sigma} + t_1^* c_{a\sigma}^{\dagger} \left(\{a_{k\sigma}, a_{p\sigma'}^{\dagger}\}a_{p\sigma'} - a_{p\sigma'}^{\dagger}\{a_{k\sigma}, a_{p\sigma'}\} \right) \right\}$$

o que permite escrever,

$$[\hat{H}_T, \hat{N}_1] = \sum_{k\sigma} \left[-t_1 a_{k\sigma}^{\dagger} c_{a\sigma} + t_1^* c_{a\sigma}^{\dagger} a_{k\sigma} \right]$$

Substituindo estes resultados na expressão para ${\cal I}_1,$ tem-se que,

$$I_1 = -\frac{ie}{\hbar} \sum_{k\sigma} \left[-t_1 \langle a_{k\sigma}^{\dagger} c_{a\sigma} \rangle + t_1^* \langle c_{a\sigma}^{\dagger} a_{k\sigma} \rangle \right]$$

este equação é válida para um determinado tempo t, assim,

$$I_1 = \frac{e}{\hbar} \sum_{k\sigma} \left[t_1 i \langle a_{k\sigma}^{\dagger}(t) c_{a\sigma}(t) \rangle - t_1^* i \langle c_{a\sigma}^{\dagger}(t) a_{k\sigma}(t) \rangle \right]$$

e definindo:

$$G_{a1,k\sigma\sigma}^{<}(t,t') = i \langle a_{k\sigma}^{\dagger}(t')c_{a\sigma}(t) \rangle$$
(3.3.1)

pode-se reescrever I_1 da seguinte forma:

$$I_{1} = \frac{e}{\hbar} \sum_{k\sigma} \left\{ t_{1} G_{a1,k\sigma\sigma}^{<}(t,t) + t_{1}^{*} [G_{a1,k\sigma\sigma}^{<}(t,t)]^{*} \right\}$$
(3.3.2)

esta é a equação para corrente elétrica entre o ferromagneto 1 e o ponto quântico a em termos da função de Green $G_{a1,k\sigma\sigma}^{<}$. A função de correlação $G_{a1,k\sigma\sigma}^{<}$ é obtida usando a relação (D.1.4) do apêndice D, o que permite escrever

$$G_{a1,k\sigma\sigma}^{<}(t,t) = \int dt_{\zeta} [G_{aa,\sigma\sigma}^{r}(t-t_{\zeta})t_{1}^{*}g_{1,k\sigma\sigma}^{<}(t_{\zeta}-t) + G_{aa,\sigma\sigma}^{<}(t-t_{\zeta})t_{1}^{*}g_{1,k\sigma\sigma}^{a}(t_{\zeta}-t)]$$

e substituindo em (3.3.2) segue que,

$$I_1 = \frac{e}{\hbar} \sum_{k\sigma} \left\{ t_1 \int dt_{\zeta} [G^r_{aa,\sigma\sigma}(t-t_{\zeta})t_1^* g^<_{1,k\sigma\sigma}(t_{\zeta}-t) + G^<_{aa,\sigma\sigma}(t-t_{\zeta})t_1^* g^a_{1,k\sigma\sigma}(t_{\zeta}-t)] + \text{H.c.} \right\}$$

e tomando a transformada de Fourier, tem-se ainda,

$$I_{1} = \frac{e}{\hbar} \int \frac{d\omega}{2\pi} \sum_{k\sigma} \left\{ \int dt_{\zeta} [G^{r}_{aa,\sigma\sigma}(\omega)t_{1}^{*}g^{<}_{1,k\sigma\sigma}(\omega)t_{1} + G^{<}_{aa,\sigma\sigma}(\omega)t_{1}^{*}g^{a}_{1,k\sigma\sigma}(\omega)t_{1}] + \text{H.c.} \right\}$$

e usando as definições das auto-energias, pode-se escrever ainda,

$$I_1 = \frac{e}{h} \int \frac{d\omega}{2\pi} \sum_{\sigma} \left[G^r_{aa,\sigma\sigma}(\omega) \Sigma^{<}_{1,\sigma\sigma}(\omega) + G^{<}_{aa,\sigma\sigma}(\omega) \Sigma^a_{1,\sigma\sigma}(\omega) + \text{H.c.} \right]$$

É importante observar que a soma sobre σ é realizada sobre o spin do elétron. Desde que as auto-energias e funções de Green são definidas usando a notação de Nambu, então é necessário reescrever a equação da corrente em termos destas matrizes no espaço de Nambu, indicando que devem ser tomadas as componentes de spin up e down do elétron, i.e.,

$$I_1 = \frac{e}{h} \int d\omega \left[\mathbf{G}_{aa}^r(\omega) \mathbf{\Sigma}_1^<(\omega) + \mathbf{G}_{aa}^<(\omega) \mathbf{\Sigma}_1^a(\omega) + \text{H.c.} \right]_{11+33}$$
(3.3.3)

A equação (3.3.3) é a expressão para a corrente elétrica entre o ferromagneto 1 e o ponto quântico a. Esta corrente é parte da corrente total que entra no supercondutor via reflexão de Andreev. As auto-energias $\Sigma_1^<$ e Σ_1^a e as funções de Green $\mathbf{G}_{aa}^<$ e \mathbf{G}_{aa}^r são funções conhecidas. Substituindo os elementos de matriz destas funções e após algum trabalho algébrico (veja apêndice E para os detalhes), é possível reescrever (3.3.3) na seguinte maneira

$$I_1 = \frac{e}{h} \int d\omega \left[A_{11}(f_1 - \bar{f}_1) + A_{12}(f_1 - \bar{f}_2) + Q_{12}(f_1 - f_2) + Q_{1s}(f_1 - f_s) \right]$$
(3.3.4)

onde as funções de Fermi são definidas da seguinte forma: $f_1 = f(\omega - eV_1)$, $\bar{f}_1 = f(\omega + eV_1)$, $f_2 = f(\omega - eV_2)$, $\bar{f}_2 = f(\omega + eV_2)$ e $f_s = f(\omega)$. As amplitudes A_{11} , A_{12} , Q_{12} e Q_{1s} são dadas abaixo:

$$A_{11} = \Gamma_{1\uparrow} \left(|G_{aa,14}^r|^2 \Gamma_{1\uparrow} + |G_{aa,12}^r|^2 \Gamma_{1\downarrow} \right) + \Gamma_{1\downarrow} \left(|G_{aa,34}^r|^2 \Gamma_{1\uparrow} + |G_{aa,32}^r|^2 \Gamma_{1\downarrow} \right)$$

$$\begin{split} A_{12} &= \Gamma_{1\uparrow} \left[(c^2 \Gamma_{2\uparrow} + s^2 \Gamma_{2\downarrow}) |G^r_{aa,14}|^2 + (s^2 \Gamma_{2\uparrow} + c^2 \Gamma_{2\downarrow}) |G^r_{aa,12}|^2 + \\ &+ sc(\Gamma_{2\uparrow} - \Gamma_{2\downarrow}) [G^r_{aa,12}]^* G^r_{aa,14} + sc(\Gamma_{2\uparrow} - \Gamma_{2\downarrow}) [G^r_{aa,14}]^* G^r_{aa,12} \right] + \\ &+ \Gamma_{1\downarrow} \left[(c^2 \Gamma_{2\uparrow} + s^2 \Gamma_{2\downarrow}) |G^r_{aa,34}|^2 + (s^2 \Gamma_{2\uparrow} + c^2 \Gamma_{2\downarrow}) |G^r_{aa,32}|^2 + \\ &\quad sc(\Gamma_{2\uparrow} - \Gamma_{2\downarrow}) [G^r_{aa,32}]^* G^r_{aa,34} + sc(\Gamma_{2\uparrow} - \Gamma_{2\downarrow}) [G^r_{aa,34}]^* G^r_{aa,32} \right] \end{split}$$

$$\begin{split} Q_{12} &= \Gamma_{1\uparrow} \left[(c^2 \Gamma_{2\uparrow} + s^2 \Gamma_{2\downarrow}) |G^r_{aa,11}|^2 \\ &+ cs \left([G^r_{aa,13}]^* G^r_{aa,11} + [G^r_{aa,11}]^* G^r_{aa,13} \right) \left(\Gamma_{2\uparrow} - \Gamma_{2\downarrow} \right) + (s^2 \Gamma_{2\uparrow} + c^2 \Gamma_{2\downarrow}) |G^r_{aa,13}|^2 \right] + \\ &+ \Gamma_{1\downarrow} \left[(c^2 \Gamma_{2\uparrow} + s^2 \Gamma_{2\downarrow}) |G^r_{aa,31}|^2 + cs \left([G^r_{aa,33}]^* G^r_{aa,31} + [G^r_{aa,31}]^* G^r_{aa,33} \right) \left(\Gamma_{2\uparrow} - \Gamma_{2\downarrow} \right) \right. \\ &+ (s^2 \Gamma_{2\uparrow} + c^2 \Gamma_{2\downarrow}) |G^r_{aa,33}|^2 \right] \end{split}$$

$$\begin{split} Q_{1s} &= \tilde{\rho} \Gamma_s \left\{ \Gamma_{1\uparrow} \left[Y_{21}^{-} |G_{aa,12}^r|^2 + X_{34}^{+} |G_{aa,13}^r|^2 + Y_{43}^{+} |G_{aa,14}^r|^2 + X_{12}^{-} |G_{aa,11}^r|^2 \right. \\ &- Z_{34}^{+} [G_{aa,14}^r]^* G_{aa,13}^r - [Z_{34}^{+}]^* [G_{aa,13}^r]^* G_{aa,14}^r - Z_{12}^{-} [G_{aa,12}^r]^* G_{aa,11}^r - [Z_{12}^{-}]^* [G_{aa,11}^r]^* G_{aa,12}^r] \right. \\ &+ \Gamma_{1\downarrow} \left[Y_{21}^{-} |G_{aa,32}^r|^2 + X_{34}^{+} |G_{aa,33}^r|^2 + Y_{43}^{+} |G_{aa,34}^r|^2 + X_{32}^{-} |G_{aa,31}^r|^2 - \right. \\ &- Z_{34}^{+} [G_{aa,34}^r]^* G_{aa,33}^r - [Z_{34}^{+}]^* [G_{aa,33}^r]^* G_{aa,34}^r - Z_{12}^{-} [G_{aa,32}^r]^* G_{aa,31}^r - [Z_{12}^{-}]^* [G_{aa,31}^r]^* G_{aa,32}^r] \right\} \end{split}$$

onde foi definido,

$$X_{ij}^{\pm} \equiv t_{ab}^{2} \left[|G_{bb,ii}^{r0}|^{2} + |G_{bb,ij}^{r0}|^{2} \pm \frac{\Delta}{\omega} \left(G_{bb,ii}^{r0} [G_{bb,ij}^{r0}]^{*} + G_{bb,ij}^{r0} [G_{bb,ii}^{r0}]^{*} \right) \right],$$
(3.3.5)

$$Y_{ij}^{\pm} \equiv t_{ab}^{2} \left[|G_{bb,ii}^{r0}|^{2} + |G_{bb,ji}^{r0}|^{2} \pm \frac{\Delta}{\omega} \left(G_{bb,ii}^{r0} [G_{bb,ji}^{r0}]^{*} + G_{bb,ji}^{r0} [G_{bb,ii}^{r0}]^{*} \right) \right],$$
(3.3.6)

$$Z_{ij}^{\pm} = t_{ab}^2 \left[G_{bb,ij}^{r0} [G_{bb,jj}^{r0}]^* + [G_{bb,ij}^{r0}]^* G_{bb,ii}^{r0} \pm \frac{\Delta}{\omega} \left(|G_{bb,ij}^{r0}|^2 + [G_{bb,jj}^{r0}]^* G_{bb,ii}^{r0} \right) \right],$$
(3.3.7)

Nas definições acima foi utilizada a notação abreviada $s \equiv \sin \theta/2$ e $c \equiv \cos \theta/2$; $\tilde{\rho}(\omega) = \frac{|\omega|}{\sqrt{\omega^2 - \Delta^2}}$ é densidade de estados convencional da teoria BCS [90]. As constantes de acoplamento

 $\Gamma_{1\sigma} = \Gamma_1(1 + \sigma P_1), \ \Gamma_{2\sigma} = \Gamma_2(1 + \sigma P_2) \in \Gamma_s$ descrevem o acoplamento dos pontos quânticos com o ferromagneto 1, 2 e o supercondutor, respectivamente. Vale notar que as constantes que descrevem o acoplamento com o ferromagneto são definidas em termos da polarização P_i e do acoplamento médio de spin Γ_i dos ferromagnetos (ver apêndice B).

A fórmula para a corrente (3.3.4) é composta por quatro contribuições diferentes.

- 1. $A_{11}(f_1 \bar{f}_1)$ representa a reflexão de Andreev através de $F_1 PQ_a PQ_b S$ i.e., um elétron de F_1 é refletido por S em um buraco de F_1 o que pode ser deduzido pelo fator térmico $f_1 - \bar{f}_1$. A probabilidade A_{11} tem quatro termos: o termo $\Gamma_{1\uparrow}\Gamma_{1\downarrow}|G^r_{aa,12}|^2$ representa um subprocesso em que um elétron com spin up é refletido como um buraco com spin down; o termo $\Gamma_{1\uparrow}\Gamma_{1\uparrow}|G^r_{aa,14}|^2$ corresponde a um elétron com spin up que primeiramente inverte seu spin no ponto quântico, devido ao acoplamento com F_2 , e em seguida é refletido com um buraco de spin up no eletrodo F_1 . Os demais termos representam subprocessos similares aos discutidos para o caso em que o elétron incidente apresenta spin down;
- 2. A₁₂(f₁ f₂) representa a reflexão de Andreev cruzada através do sistema (F₁, F₂) PQ_a PQ_b S, i.e., um elétron de F₁ é refletido como um buraco de F₂ o que pode ser deduzido a partir do fator térmico f₁ f₂. A probabilidade A₁₂ é mais complicada do que A₁₁ devido a polarização de F₂ estar orientada a um ângulo θ com o eixo de quantização de spin. Os termos contendo o módulo quadrado da função de Green podem ser interpretados de maneira similar aos que aparecem na fórmula para A₁₁, bastando projetar o eixo de quantização de F₂ em uma direção escolhida. Os demais termos, envolvendo um produtos de seno e cosseno, podem ser vistos como termos de interferência.
- 3. $Q_{1s}(f_1 f_s)$ representa o tunelamento direto de quasipartículas através de $F_1 PQ_a PQ_b S$. Conforme pode ser observado pela densidade de estados $\tilde{\rho}$, que aparece multiplicando todos os fatores de Q_{1s} , este processo só ocorre para $|\omega| > \Delta$. Este processo é dividido em dois subgrupos: um para elétrons com spin up e outro para elétrons com spin down. Cada subgrupo contém quatro subprocessos e seus respectivos termos de interferência;
- 4. $Q_{12}(f_1 f_2)$ representa o tunelamento através do caminho $F_1 PQ_a PQ_b F_2$ e os termos correspondentes podem ser analisados de modo similar ao que foi realizado para os três primeiros processos.

Corrente elétrica entre o ferromagneto 2 e o ponto quântico a

A corrente I_1 representa uma contribuição parcial para a corrente total. Também é necessário considerar o fluxo de elétrons entre o ferromagneto 2 e o ponto quântico *a*. Para determinar esta corrente a qual será chamada I_2 são aplicados os mesmos procedimentos usados para obter I_1 . O cálculo é completamente similar ao que foi feito par o caso da corrente I_1 , bastando trocar os índices 1 por 2 nas equações. Assim tem-se que,

$$I_2 = \frac{e}{h} \int d\omega \left[\mathbf{G}_{aa}^r(\omega) \boldsymbol{\Sigma}_2^<(\omega) + \mathbf{G}_{aa}^<(\omega) \boldsymbol{\Sigma}_2^a(\omega) + \text{H.c.} \right]_{11+33}.$$
(3.3.8)

Substituindo as funções de Green e auto-energias e após alguma álgebra obtém-se que,

$$I_2 = \frac{e}{h} \int d\omega [A_{22}(f_2 - \bar{f}_2) + A_{21}(f_2 - \bar{f}_1) + Q_{21}(f_2 - f_1) + Q_{2s}(f_2 - f_s)]$$
(3.3.9)

onde as amplitudes são dadas por,

$$\begin{aligned} A_{22} &= \left(\Gamma_{2\uparrow}c^{2} + s^{2}\Gamma_{2\downarrow}\right)^{2} |G_{aa,14}^{r}|^{2} \\ &+ c^{2}s^{2} \left(G_{aa,34}^{r}[G_{aa,12}^{r}]^{*} + [G_{aa,34}^{r}]^{*}G_{aa,12}^{r} + G_{aa,14}^{r}[G_{aa,32}^{r}]^{*} + [G_{aa,32}^{r}]^{*}G_{aa,32}^{r}\right) \left(\Gamma_{2\downarrow} - \Gamma_{2\uparrow}\right)^{2} + \\ &+ |G_{aa,32}^{r}|^{2} \left(\Gamma_{2\downarrow}c^{2} + s^{2}\Gamma_{2\uparrow}\right)^{2} + \left(|G_{aa,12}^{r}|^{2} + |G_{aa,34}^{r}|^{2}\right) \left(\Gamma_{2\uparrow}c^{2} + s^{2}\Gamma_{2\downarrow}\right) \left(\Gamma_{2\downarrow}c^{2} + s^{2}\Gamma_{2\uparrow}\right) + \\ &+ cs \left(\Gamma_{2\uparrow} - \Gamma_{2\downarrow}\right) \left\{ \left(G_{aa,14}^{r}[G_{aa,12}^{r}]^{*} + [G_{aa,14}^{r}]^{*}G_{aa,12}^{r} + G_{aa,14}^{r}[G_{aa,34}^{r}]^{*} + [G_{aa,34}^{r}]^{*} + [G_{aa,34}^{r}]^{*}G_{aa,34}^{r}\right) \times \\ &\left(\Gamma_{2\uparrow}c^{2} + s^{2}\Gamma_{2\downarrow}\right) + \left(G_{aa,32}^{r}[G_{aa,12}^{r}]^{*} + [G_{aa,32}^{r}]^{*}G_{aa,12}^{r} + G_{aa,32}^{r}[G_{aa,34}^{r}]^{*} + [G_{aa,32}^{r}]^{*}G_{aa,34}^{r}\right) \\ &\times \left(\Gamma_{2\downarrow}c^{2} + s^{2}\Gamma_{2\downarrow}\right) + \left(G_{aa,32}^{r}[G_{aa,12}^{r}]^{*} + [G_{aa,32}^{r}]^{*}G_{aa,12}^{r} + G_{aa,32}^{r}[G_{aa,34}^{r}]^{*} + [G_{aa,32}^{r}]^{*}G_{aa,34}^{r}\right) \\ &\times \left(\Gamma_{2\downarrow}c^{2} + s^{2}\Gamma_{2\uparrow}\right) \right\}, \quad (3.3.10) \end{aligned}$$

$$\begin{split} A_{21} &= \Gamma_{1\downarrow} \left[\left(\Gamma_{2\uparrow} c^2 + s^2 \Gamma_{2\downarrow} \right) |G_{aa,12}^r|^2 \\ &+ cs \left(G_{aa,32}^r [G_{aa,12}^r]^* + [G_{aa,32}^r]^* G_{aa,12}^r \right) \left(\Gamma_{2\uparrow} - \Gamma_{2\downarrow} \right) + |G_{aa,32}^r|^2 \left(\Gamma_{2\downarrow} c^2 + s^2 \Gamma_{2\uparrow} \right) \right] + \\ &+ \Gamma_{1\uparrow} \left[\left(\Gamma_{2\uparrow} c^2 + s^2 \Gamma_{2\downarrow} \right) |G_{aa,14}^r|^2 + cs \left(G_{aa,34}^r [G_{aa,14}^r]^* + [G_{aa,34}^r]^* G_{aa,14}^r \right) \left(\Gamma_{2\uparrow} - \Gamma_{2\downarrow} \right) \\ &+ |G_{aa,34}^r|^2 \left(\Gamma_{2\downarrow} c^2 + s^2 \Gamma_{2\uparrow} \right) \right] \quad (3.3.11) \end{split}$$

$$\begin{aligned} Q_{21} &= \Gamma_{1\uparrow} \left[\left(\Gamma_{2\uparrow} c^2 + s^2 \Gamma_{2\downarrow} \right) |G_{aa,11}^r|^2 \\ &+ cs \left(G_{aa,31}^r [G_{aa,11}^r]^* + [G_{aa,31}^r]^* G_{aa,11}^r \right) (\Gamma_{2\uparrow} - \Gamma_{2\downarrow}) + |G_{aa,31}^r|^2 \left(\Gamma_{2\downarrow} c^2 + s^2 \Gamma_{2\uparrow} \right) \right] + \\ &+ \Gamma_{1\downarrow} \left[\left(\Gamma_{2\uparrow} c^2 + s^2 \Gamma_{2\downarrow} \right) |G_{aa,13}^r|^2 + cs \left(G_{aa,33}^r [G_{aa,13}^r]^* + [G_{aa,33}^r]^* G_{aa,13}^r \right) (\Gamma_{2\uparrow} - \Gamma_{2\downarrow}) \\ &+ |G_{aa,33}^r|^2 \left(\Gamma_{2\downarrow} c^2 + s^2 \Gamma_{2\uparrow} \right) \right], \quad (3.3.12) \end{aligned}$$

$$\begin{split} &Q_{2s} = \tilde{\rho} \Gamma_{s} \Big\{ \\ &Y_{43}^{+} \left[csG_{aa,34}^{r} \left(\Gamma_{2\uparrow} - \Gamma_{2\downarrow} \right) \left[G_{aa,14}^{r} \right]^{*} + cs[G_{aa,34}^{r} \right]^{*} \left(\Gamma_{2\uparrow} - \Gamma_{2\downarrow} \right) G_{aa,14}^{r} + \left(\Gamma_{2\uparrow}c^{2} + s^{2}\Gamma_{2\downarrow} \right) \right] G_{aa,14}^{r} \Big|^{2} \\ &|G_{aa,34}^{r}|^{2} \left(\Gamma_{2\downarrow}c^{2} + s^{2}\Gamma_{2\uparrow} \right) \right] + X_{12}^{-} \left[csG_{aa,31}^{r} \left(\Gamma_{2\uparrow} - \Gamma_{2\downarrow} \right) \left[G_{aa,11}^{r} \right]^{*} + cs[G_{aa,31}^{r}]^{*} \left(\Gamma_{2\uparrow} - \Gamma_{2\downarrow} \right) G_{aa,11}^{r} \right] \\ &+ \left(\Gamma_{2\uparrow}c^{2} + s^{2}\Gamma_{2\downarrow} \right) \left[G_{aa,11}^{r} \right]^{2} + \left[G_{aa,32}^{r} \right]^{2} \left(\Gamma_{2\downarrow}c^{2} + s^{2}\Gamma_{2\downarrow} \right) \right] \\ &+ Y_{21}^{-} \left[csG_{aa,32}^{r} \left(\Gamma_{2\uparrow} - \Gamma_{2\downarrow} \right) \left[G_{aa,12}^{r} \right]^{2} + cs[G_{aa,32}^{r}]^{*} \left(\Gamma_{2\uparrow} - \Gamma_{2\downarrow} \right) G_{aa,12}^{r} \right] \\ &+ \left(\Gamma_{2\uparrow}c^{2} + s^{2}\Gamma_{2\downarrow} \right) \left[G_{aa,12}^{r} \right]^{2} + cs[G_{aa,32}^{r}]^{2} \left(\Gamma_{2\downarrow}c^{2} + s^{2}\Gamma_{2\downarrow} \right) \right] \\ &+ X_{34}^{+} \left[csG_{aa,33}^{r} \left(\Gamma_{2\uparrow} - \Gamma_{2\downarrow} \right) \left[G_{aa,13}^{r} \right]^{2} + cs[G_{aa,33}^{r}]^{2} \left(\Gamma_{2\downarrow}c^{2} + s^{2}\Gamma_{2\downarrow} \right) \right] \\ &+ X_{34}^{-} \left[csG_{aa,32}^{r} \left(\Gamma_{2\downarrow} - \Gamma_{2\downarrow} \right) \left[G_{aa,13}^{r} \right]^{2} + cs[G_{aa,33}^{r}]^{*} \left(\Gamma_{2\uparrow} - \Gamma_{2\downarrow} \right) G_{aa,13}^{r} \right] \\ &+ \left(\Gamma_{2\uparrow}c^{2} + s^{2}\Gamma_{2\downarrow} \right) \left| G_{aa,13}^{r} \right]^{2} \left(\Gamma_{2\downarrow}c^{2} + s^{2}\Gamma_{2\downarrow} \right) \right] \\ &+ Z_{12}^{-} \left[\left(cs[G_{aa,32}^{r}]^{*} \left(\Gamma_{2\downarrow} - \Gamma_{2\uparrow} \right) - \left[G_{aa,32}^{r} \right]^{*} \left(\Gamma_{2\downarrow}c^{2} + s^{2}\Gamma_{2\downarrow} \right) \right] \right] \\ &+ Z_{12}^{-} \left[\left(cs[G_{aa,32}^{r} \left(\Gamma_{2\downarrow} - \Gamma_{2\uparrow} \right) - \left[G_{aa,32}^{r} \left(\Gamma_{2\downarrow}c^{2} + s^{2}\Gamma_{2\downarrow} \right) \right) \right] \\ &+ \left[Z_{12}^{-} \right]^{*} \left[\left(csG_{aa,32}^{r} \left(\Gamma_{2\downarrow} - \Gamma_{2\uparrow} \right) - \left[G_{aa,32}^{r} \left(\Gamma_{2\uparrow}c^{2} + s^{2}\Gamma_{2\downarrow} \right) \right) \right] \\ &+ \left[G_{aa,31}^{r} \left(csG_{aa,34}^{r} \left(\Gamma_{2\downarrow} - \Gamma_{2\uparrow} \right) - \left[G_{aa,34}^{r} \left(\Gamma_{2\uparrow}c^{2} + s^{2}\Gamma_{2\downarrow} \right) \right) \right] \\ &+ \left[Z_{34}^{r} \left[\left(cs[G_{aa,34}^{r} \left(\Gamma_{2\downarrow} - \Gamma_{2\uparrow} \right) - \left[G_{aa,34}^{r} \left(\Gamma_{2\uparrow}c^{2} + s^{2}\Gamma_{2\downarrow} \right) \right) \right] \\ &+ \left[C_{aa,33}^{r} \left(csG_{aa,34}^{r} \left(\Gamma_{2\downarrow} - \Gamma_{2\uparrow} \right) - \left[C_{aa,34}^{r} \left(\Gamma_{2\uparrow}c^{2} + s^{2}\Gamma_{2\downarrow} \right) \right) \right] \\ &+ \left[C_{aa,33}^{r} \left(csG_{aa,34}^{r} \left(\Gamma_{2\downarrow} - \Gamma_{2\uparrow} \right) - \left[C_{aa,34}^{r} \left(\Gamma_{2\uparrow}c^{2} + s^{2}\Gamma_{2\downarrow} \right) \right) \right$$

As amplitudes apresentam as mesmas interpretações que foram adotadas para explicar a corrente I_1 . As expressões são mais complicadas neste caso por causa dos fatores angulares desde que o eixo de quantização de spin do ferromagneto 2 está orientado com um ângulo θ em relação ao spin do ferromagneto 1. Novamente, existem quatro processos que contribuem para a corrente. $A_{22}(f_2 - \bar{f}_2)$ corresponde a reflexão de Andreev no ferromagneto 2, $A_{21}(f_2 - \bar{f}_1)$ corresponde a reflexão de Andreev no ferromagneto 2, $A_{21}(f_2 - \bar{f}_1)$ corresponde a reflexão de Andreev cruzada entre os dois ferromagnetos, $Q_{2s}(f_2 - f_s)$ do tunelamento direto de quasipartículas através de $F_2 - PQ_a - PQ_b - S$, e o processo $Q_{21}(f_2 - f_1)$ justifica o tunelamento entre os dois ferromagnetos, i.e., corresponde ao tunelamento entre $F_2 - PQ_a - PQ_b - F_1$.

Corrente elétrica total

A corrente elétrica total entre os ferromagnetos e o supercondutor é igual a soma das correntes $I_1 \in I_2$, i.e.,

$$I = I_1 + I_2$$

o que implica em,

$$I = \frac{e}{h} \int d\omega [A_{11}(f_1 - \bar{f}_1) + A_{12}(f_1 - \bar{f}_2) + Q_{12}(f_1 - f_2) + Q_{1s}(f_1 - f_s) + A_{22}(f_2 - \bar{f}_2) + A_{21}(f_2 - \bar{f}_1) + Q_{21}(f_2 - f_1) + Q_{2s}(f_2 - f_s)] \quad (3.3.14)$$

Considerando a estrutura da função de Green \mathbf{G}_{aa}^r , é possível fazer algumas simplificações adicionais na equação (3.3.14). Em particular, os elementos $G_{aa,13}^r$ e $G_{aa,31}^r$ são iguais de modo que $Q_{12} = Q_{21}$. Desta forma, devido aos fatores térmicos multiplicando estas amplitudes estas contribuições se cancelam, assim a corrente total pode ser escrita na forma final,

$$I = \frac{e}{h} \int d\omega [A_{11}(f_1 - \bar{f}_1) + A_{22}(f_2 - \bar{f}_2) + A_{12}(f_1 - \bar{f}_2) + A_{21}(f_2 - \bar{f}_1) + Q_{1s}(f_1 - f_s) + Q_{2s}(f_2 - f_s)].$$
(3.3.15)

A equação (3.3.15) é o resultado central deste trabalho e pode ser aplicada para os ferromagnetos $F_1 \in F_2$ com polarizações, orientações relativas da magnetização e potenciais aplicados externo e de gate arbitrários. No entanto, como o objetivo deste trabalho é investigar os processos de condução via reflexão de Andreev, os potenciais aplicados serão restritos ao gap supercondutor de modo que as contribuições de tunelamento direto de quasipartículas, $Q_{1s} \in Q_{2s}$, serão descartadas.

3.3.2 Cálculo da ocupação nos pontos quânticos

Como é evidente da equação (3.1.9), a introdução de interações implica que os níveis dos pontos quânticos estão renormalizados pela ocupação média de cada ponto quântico. Em conseqüência, todas as demais quantidades físicas são funções da ocupação. Desta forma é essencial desenvolver expressões para o cálculo da ocupação nos pontos quânticos.

Ocupação no ponto quântico a

O valor médio da ocupação para elétrons com spin up no ponto quântico a é dada por,

$$\langle \hat{n}_{a\uparrow} \rangle = \langle c_{a\uparrow}^{\dagger}(t) c_{a\uparrow}(t) \rangle$$

a média pode ser escrita em termos do elemento de matriz 11 da função de Green de correlação, i.e.,

$$\langle \hat{n}_{a\uparrow} \rangle = -i \left. G_{aa,11}^{<}(t,t') \right|_{t=t'}$$

e reescrevendo a equação acima no espaço de Fourier, segue que;

$$\langle \hat{n}_{a\uparrow} \rangle = \frac{1}{2\pi i} \int d\omega \ G_{aa,11}^{<} \left[\omega, \langle \hat{n}_{a\uparrow} \rangle, \langle \hat{n}_{a\downarrow} \rangle, \langle \hat{n}_{b\uparrow} \rangle, \langle \hat{n}_{b\downarrow} \rangle \right]$$
(3.3.16)

onde foi indicada a dependência de $G^{<}_{aa,11}$ com a ocupação média nos pontos quânticos.

Seguindo o mesmo raciocínio para a ocupação eletrônica com spin down, segue que,

$$\langle \hat{n}_{a\downarrow} \rangle = \frac{1}{2\pi i} \int d\omega \ G_{aa,33}^{<} \left[\omega, \langle \hat{n}_{a\uparrow} \rangle, \langle \hat{n}_{a\downarrow} \rangle, \langle \hat{n}_{b\uparrow} \rangle, \langle \hat{n}_{b\downarrow} \rangle \right].$$
(3.3.17)

Ocupação do ponto quântico b

A obtenção das expressões para a ocupação média seguem diretamente dos elementos de matriz da função de Green de correlação $\mathbf{G}_{bb}^{<}$, assim tem-se que,

$$\langle \hat{n}_{b\uparrow} \rangle = \frac{1}{2\pi i} \int d\omega \ G_{bb,11}^{<} \left[\omega, \langle \hat{n}_{a\uparrow} \rangle, \langle \hat{n}_{a\downarrow} \rangle, \langle \hat{n}_{b\uparrow} \rangle, \langle \hat{n}_{b\downarrow} \rangle \right]$$
(3.3.18)

Seguindo o mesmo raciocínio para a ocupação eletrônica com spin down, tem-se que,

$$\langle \hat{n}_{b\downarrow} \rangle = \frac{1}{2\pi i} \int d\omega \ G_{bb,33}^{<} \left[\omega, \langle \hat{n}_{a\uparrow} \rangle, \langle \hat{n}_{a\downarrow} \rangle, \langle \hat{n}_{b\uparrow} \rangle, \langle \hat{n}_{b\downarrow} \rangle \right].$$
(3.3.19)

As equações (3.3.16), (3.3.17), (3.3.18) e (3.3.19) formam um sistema de equações acopladas e devem ser resolvidas simultâneamente de maneira auto-consistente, visto que os elementos de matriz da função de Green são funcionais da ocupação média.

3.3.3 Cálculo da densidade local de estados (LDOS)

A densidade local de estados (LDOS) é determinada tomando-se a parte imaginária da função de Green retardada. No caso presente em que está sendo utilizada a notação de Nambu, a LDOS é obtida a partir das componentes 11 e 33 da matriz \mathbf{G}^r . Assim, para o ponto quântico *a*, a LDOS é definida por,

$$\text{LDOS-A} = -\frac{1}{\pi} \text{Im}[G_{aa,11}^r + G_{aa,33}^r]$$

pode-se reescrever a equação acima da seguinte maneira:

LDOS-A =
$$-\frac{1}{2\pi i} \left([G_{aa,11}^r] - [G_{aa,11}^r]^* + [G_{aa,33}^r] - [G_{aa,33}^r]^* \right)$$

ou ainda,

LDOS-A =
$$\frac{1}{2\pi} \left(A_{aa,11} + A_{aa,33} \right)$$
 (3.3.20)

onde,

$$\mathbf{A}_{aa} = i(\mathbf{G}_{aa}^r - \mathbf{G}_{aa}^a) \tag{3.3.21}$$

é a matriz função espectral do ponto quântico a, escrita na notação de Nambu. Conforme mostrado no apêndice E (eq. E.1.18), a diferença $\mathbf{G}_{aa}^r - \mathbf{G}_{aa}^a = \mathbf{G}_{aa}^r \Gamma_{Ta} \mathbf{G}_{aa}^a$, assim, a equação (3.3.21) pode ser reescrita da seguinte forma,

$$\mathbf{A}_{aa} = i \mathbf{G}_{aa}^r \mathbf{\Gamma}_{Ta} \mathbf{G}_{aa}^a \tag{3.3.22}$$

sendo,

$$\mathbf{\Gamma}_{Ta} = \mathbf{\Gamma}_L + \mathbf{t}_{ab}^{\dagger} \mathbf{G}_{bb}^{r0} \mathbf{\Gamma}_R \mathbf{G}_{bb}^{a0} \mathbf{t}_{ab}$$

onde foi definido,

$$\Gamma_i(\omega) = \Sigma_i^a - \Sigma_i^r \qquad i = L, R.$$

As auto-energias $\Sigma_L^{r,a}$ e $\Sigma_R^{r,a}$ são determinadas no apêndice B. A equação (3.3.22) permite determinar a densidade local de estados do ponto quântico *a*.

A LDOS-B para o ponto quântico b apresenta uma equação análoga:

LDOS-B =
$$\frac{1}{2\pi} (A_{bb,11} + A_{bb,33})$$
 (3.3.23)

 $A_{bb,11}$ e $A_{bb,33}$ são elementos de matriz da função espectral:

$$\mathbf{A}_{bb} = i \mathbf{G}_{bb}^r \mathbf{\Gamma}_{Tb} \mathbf{G}_{bb}^a \tag{3.3.24}$$

onde,

$$\mathbf{\Gamma}_{Tb} = \mathbf{\Gamma}_{R} + \mathbf{t}_{ab}^{\dagger} \mathbf{G}_{aa}^{r0} \mathbf{\Gamma}_{L} \mathbf{G}_{aa}^{a0} \mathbf{t}_{ab}.$$

3.4 Procedimento numérico

As expressões derivadas na seção anterior permitem determinar as quantidades físicas de interesse que caracterizam o transporte eletrônico. O procedimento geral para obter estas quantidades consiste primeiramente em especificar os parâmetros fixos: as constantes de acoplamento (Γ_1 , Γ_2 e



Figura 3.2: Diagrama mostrando o algoritmo numérico utilizado na implementação do cálculo autoconsistente da ocupação média e do cálculo das quantidades físicas usadas para caracterizar o transporte eletrônico no sistema $(F_1, F_2) - PQ_a - PQ_b - S$.

 Γ_s), o parâmetro de "hopping" t_{ab} entre os pontos quânticos, polarizações dos ferromagnetos (P_1 e P_2), constantes de interação $\mathcal{U} \in \mathcal{K}$ e os potenciais aplicados $V_1 \in V_2$ e de gate $V_{ga} \in V_{gb}$. Todos os parâmetros são especificados em unidades do gap supercondutor. As constantes de acoplamento usualmente variam de 0.01 Δ para um acoplamento fraco a Δ para um acoplamento forte entre os eletrodos [92]. Na maioria das situações consideradas neste trabalho, os valores especificados ficam entre estes dois limites. Os potenciais aplicados variam desde $-\Delta/e$ a $+\Delta/e$, desde que está sendo considerado o transporte via reflexão de Andreev que ocorre para energias situadas dentro do gap supercondutor. Além disso, a intensidade das interações também é considerada ser menor do que

o gap supercondutor. No caso da interação intradot \mathcal{U} esta é uma condição essencial para que ocorra o transporte desde que é necessário que exista a possibilidade de dupla ocupação nos pontos quânticos.

O próximo passo consiste em determinar os valores médios $\langle \hat{n}_{a\uparrow} \rangle$, $\langle \hat{n}_{a\downarrow} \rangle$, $\langle \hat{n}_{b\uparrow} \rangle$ e $\langle \hat{n}_{b\downarrow} \rangle$. Para este fim, primeiro são atribuídos valores iniciais para estas quantidades e em seguida, calcula-se o valor de $G_{aa,11}^<$, $G_{aa,33}^<$, $G_{bb,11}^<$, e $G_{bb,33}^<$. Substituindo-se o valor destes elementos de matriz nas equações (3.3.16), (3.3.17), (3.3.18) e (3.3.19), obtém-se novos valores para as ocupações médias. Este procedimento é repetido até atingir a convergência dos valores calculados. Por último são determinadas as grandezas de interesse, como a corrente elétrica, densidades local de estados, transmitância, etc. Um diagrama é mostrado na figura 3.2 ilustrando todas as etapas do cálculo numérico.
Parte II

RESULTADOS

Resultados para o sistema $F_1 - PQ_a - PQ_b - S$

Neste capítulo serão considerados os resultados para o sistema $F_1 - PQ_a - PQ_b - S$. Este sistema é obtido desconectando o segundo eletrodo ferromagnético do sistema completo, mostrado na figura 3.1 do capítulo 3. A análise deste sistema mais simples (figura 4.1) permitirá verificar algumas propriedades que não dependem da reflexão de Andreev cruzada de modo a se obter um entendimento melhor das propriedades de transporte para o caso com dois eletrodos.

Primeiramente serão consideradas as propriedades de transporte no caso de equilíbrio, i.e., na ausência de potenciais aplicados. A seguir, serão apresentados os resultados para o caso em que potenciais externos (bias) são aplicados na ausência de interações. Finalmente, o caso completo na presença de interações nos pontos quânticos será considerado.

Neste sistema será considerado que o supercondutor é aterrado e o ferromagneto é submetido a um potencial externo V. Também serão permitidas interações de campo médio nos pontos quânticos e, além disso, estes podem ser submetidos a potenciais de gate V_{ga} e V_{gb} . No entanto, será conside-



Figura 4.1: Diagrama esquemático do sistema $F_1 - PQ_a - PQ_b - S$ obtido do sistema $(F_1, F_2) - PQ_a - PQ_b - S$ desconectando-se o segundo eletrodo. Este sistema mais simples permite investigar a função dos pontos quânticos sobre as propriedades de transporte sem as complicações dos canais de reflexão de Andreev cruzada.

rada que a magnetização do eletrodo ferromagnético é fixa e paralela ao eixo \hat{z} .

A corrente elétrica para o sistema $F_1 - PQ_a - PQ_b - S$ pode ser obtida fazendo-se $\Gamma_2 = 0$ na equação para a corrente I_1 . Com isso, tem-se que,

$$I(V) = \frac{e}{h} \int d\omega \left[A_{11}(\omega)(f_1 - \bar{f}_1) + Q_{1s}(\omega)(f_1 - f_s) \right]$$
(4.0.1)

onde,

$$A_{11} = \Gamma_{1\uparrow} \Gamma_{1\downarrow} \left(|G_{aa,12}^r|^2 + |G_{aa,34}^r|^2 \right)$$
(4.0.2)

$$\begin{aligned} Q_{1s} &= \tilde{\rho} \Gamma_s \left\{ \Gamma_{1\uparrow} \left[Y_{21}^{-} | G_{aa,12}^{r} |^2 + X_{34}^{+} | G_{aa,13}^{r} |^2 + Y_{43}^{+} | G_{aa,14}^{r} |^2 + X_{12}^{-} | G_{aa,11}^{r} |^2 - Z_{34}^{+} [G_{aa,14}^{r}]^* G_{aa,13}^{r} \right. \\ &\left. - [Z_{34}^{+}]^* [G_{aa,13}^{r}]^* G_{aa,14}^{r} - Z_{12}^{-} [G_{aa,12}^{r}]^* G_{aa,11}^{r} - [Z_{12}^{-}]^* [G_{aa,11}^{r}]^* G_{aa,12}^{r} \right] \\ &+ \Gamma_{1\downarrow} \left[Y_{21}^{-} | G_{aa,32}^{r} |^2 + X_{34}^{+} | G_{aa,33}^{r} |^2 + Y_{43}^{+} | G_{aa,34}^{r} |^2 + X_{12}^{-} | G_{aa,31}^{r} |^2 - Z_{34}^{+} [G_{aa,34}^{r}]^* G_{aa,33}^{r} \right. \\ &\left. - [Z_{34}^{+}]^* [G_{aa,33}^{r}]^* G_{aa,34}^{r} - Z_{12}^{-} [G_{aa,32}^{r}]^* G_{aa,31}^{r} - [Z_{12}^{-}]^* [G_{aa,31}^{r}]^* G_{aa,32}^{r} \right] \right\} \quad (4.0.3) \end{aligned}$$

onde A_{11} é a amplitude para reflexão de Andreev e Q_{1s} é a amplitude para tunelamento direto de quasipartículas.

Desde que os potenciais aplicados serão restritos a valores inferiores ao gap de energia, a amplitude Q_{1s} é igual a zero por causa da densidade de estados BCS, $\tilde{\rho}$. Desta forma, somente o termo $A_{11}(\omega)(f_1 - \bar{f}_1)$ contribui para a corrente elétrica. Com isso a equação (4.0.1) pode ser reescrita da seguinte forma,

$$I(V) = \frac{2e}{h} \int d\omega \ T_{AR}(\omega) [f(\omega - eV) - f(\omega + eV)]$$
(4.0.4)

onde foi definida a transmitância por reflexão de Andreev:

$$T_{AR} = \frac{1}{2} A_{11}(\omega) \tag{4.0.5}$$

Nota-se que a corrente elétrica dada pela equação (4.0.4) apresenta uma forma similar a equação de Landauer para a corrente elétrica [81]. No entanto, neste caso as distribuições de Fermi correspondem ao mesmo eletrodo desde que o processo de condução ocorre via reflexão de Andreev.

4.1 Resultados para o caso não-interagente

Nesta seção serão apresentadas as propriedades de transporte na ausência de interação nos pontos quânticos. Com isso, as análises serão concentradas na função das constantes de acoplamento e na polarização sobre as propriedades de transporte.

4.1.1 Condutância em zero bias

Antes de considerar a aplicação de potencial externo ao sistema, é interessante verificar o comportamento do sistema quando V = 0. No limite $V \rightarrow 0$ a expressão para a corrente (4.0.4) pode ser escrita como:

$$I(V \to 0) = \frac{2e}{h} T_{AR}(\omega = 0) eV$$

o que permite definir a condutância da seguinte forma,

$$G = \frac{2e^2}{h}T_{AR}(\omega = 0)$$

Substituindo-se os elementos de matriz da função de Green para $\omega = 0$, pode-se escrever após alguma álgebra:

$$G_{FDS} = \frac{16e^2}{h} \frac{(1-P^2)r^2}{(1-P^2+r^2)^2}.$$
(4.1.1)

onde,

$$P = \frac{\Gamma_{1\uparrow} - \Gamma_{1\downarrow}}{\Gamma_{1\uparrow} + \Gamma_{1\downarrow}}$$

que é a polarização do ferromagneto definida em termos das constantes de acoplamento do ferromagneto com o ponto quântico a.

A constante r é definida como a razão entre as constantes de acoplamento à direita e à esquerda do ponto quântico a, i.e.,

$$r = \frac{\Gamma_R}{\Gamma_L}$$
, onde: $\Gamma_L = \Gamma_1$, e $\Gamma_R = \frac{4t_{ab}^2}{\Gamma_s}$

onde,

$$\Gamma_1 = \frac{1}{2} (\Gamma_{1\uparrow} + \Gamma_{1\downarrow})$$

é a média entre as constantes de acoplamento por spin do ferromagneto.

A constante r que aparece na equação para a condutância mostra que o sistema pode ser visto como sendo composto por apenas um ponto quântico acoplado a dois eletrodos: o eletrodo ferromagnético cujo acoplamento é caracterizado pela constante Γ_L e um segundo eletrodo efetivo composto do segundo ponto quântico conectado ao supercondutor. O acoplamento com este eletrodo efetivo é caracterizado pela constante $\Gamma_R = \frac{4t_{ab}^2}{\Gamma_s}$. Com efeito, a equação (4.1.1) é similar ao resultado obtido por Lin *et al.* [92] para o sistema composto por um ponto quântico. Esta propriedade tinha sido verificada nas expressões para as auto-energias de correlação $\Sigma^{<}$ dadas pelas equações (3.2.40) e (3.2.41) do capítulo 3.

A equação (4.1.1) apresenta um máximo para um valor P_0 tal que a condição $P_0^2 + r^2 = 1$ seja satisfeita. Desde que a polarização varia apenas entre 0 e 1, então esta condição é satisfeita apenas para valores de r < 1. Este comportamento pode ser observado nas figuras 4.2a e 4.2b. Para valores de r > 1 a figura 4.2a mostra que a condutância apresenta uma redução monotônica com o aumento da polarização atingindo o valor nulo quando P = 1. Isto é esperado desde que para P = 1 todos os elétrons do ferromagneto apresentam spin up o que proíbe a reflexão de Andreev. Para r < 1, a condutância cresce até um valor máximo e em seguida é rapidamente suprimida com o aumento de P.



Figura 4.2: Condutância em zero bias para diferentes valores do parâmetro de acoplamento r. (a) r > 1, onde a condição de matching não é satisfeita. (b) r < 1 onde a condição de matching é satisfeita. Neste caso surge um máximo na condutância para o valor da polarização satisfazendo a condição $P^2 + r^2 = 1$.

Usando as definições de P e r, é possível reescrever a condição de máximo $P_0^2 + r^2 = 1$ na forma: $\Gamma_{1\uparrow}\Gamma_{1\downarrow} = \Gamma_R^2$. Esta condição é análoga à condição de matching para as velocidades de Fermi obtida por Jong & Beenakker [36] para uma junção ferromagnética/supercondutora (F/S). Neste trabalho, os autores determinaram a condutância de uma junção F/S através do cálculo da probabilidade de transmissão e de reflexão de elétrons na interface. No caso de um metal ferromagnético, um elétron que incide na interface tem probabilidade $|r_{ee}|^2$ de ser refletido como elétron e uma probabilidade $|r_{eh}|^2$ de ser refletido com um buraco. Seguindo a referência [36], as amplitudes r_{ee} e r_{eh} são dadas por,

$$r_{ee} = rac{k_{F\uparrow}k_{F\downarrow} - k_s^2}{k_{F\uparrow}k_{F\downarrow} + k_s^2}$$
 $r_{eh} = -rac{2ik_s\sqrt{k_{F\uparrow}k_{F\downarrow}}}{k_{F\uparrow}k_{F\downarrow} + k_s^2}$

e conforme pode ser observado, a probabilidade r_{ee} é igual a zero quando a condição $k_{F\uparrow}k_{F\downarrow} = k_s^2$ é satisfeita. Neste caso, todos elétrons incidentes na interface são refletidos como buracos e a reflexão de Andreev é máxima.

Fazendo-se uma analogia com a junção F/S então a condição $\Gamma_{1\uparrow}\Gamma_{1\downarrow} = \Gamma_R^2$ corresponde ao valor ótimo onde todos os elétrons injetados no supercondutor são refletidos como buraco, i.e, a transferência de cargas do ferromagneto para o supercondutor é máxima. O ponto quântico *a* desempenha o papel de interface entre dois eletrodos efetivos: o ferromagneto e a combinação ponto quântico *b*+supercondutor.

4.1.2 Transporte com voltagem (bias) finita

A seguir são consideradas as propriedades de transporte para um potencial aplicado no ferromagneto. Primeiramente serão analisadas as funções das constantes de acoplamento, a seguir o efeito da polarização do ferromagneto e finalmente a função dos potenciais de gate sobre a corrente elétrica.

Efeito das constantes de acoplamento

Em zero bias, a condutância é determinada pelas constantes de acoplamento Γ_L e Γ_R e a estrutura interna dos estados dos pontos quânticos não são relevantes para o transporte. No entanto, para bias finita, a T_{AR} e a LDOS dos pontos quânticos exercem um papel crucial sobre as propriedades de transporte. Na figura 4.6 são apresentadas algumas curvas $I \times V$ para diferentes valores do parâmetro de hopping t_{ab} .

Conforme pode ser observado da figura 4.3, à medida que t_{ab} aumenta, a corrente vai assumindo uma estrutura de platôs bem definida. Para $t_{ab} = 0, 15 e 0, 25$, a corrente apresenta dois platôs bem definidos correspondentes aos picos que aparecem nas curvas de transmitância. Para $t_{ab} = 0, 60$ a transmitância apresenta quatro picos bem definidos o que implica em quatro platôs nas curvas $I \times V$. Estes resultados mostram que a estrutura eletrônica dos pontos quânticos dominam a forma das curvas $I \times V$ para o caso de bias finita.

A estrutura de quatro picos que aparece nas curvas de transmitância pode ser entendida considerando-



Figura 4.3: (a) Curva $I \times V$ para alguns valores de t_{ab} . (b) Curvas de transmitância (T_{AR}) correspondentes. Nota-se que com o aumento de t_{ab} a corrente passa a exibir um número maior de platôs correspondentes à estrutura discreta da transmitância. Parâmetros fixos: P = 0, $\Gamma_s = 1,00$, $\Gamma_1 = 0,20$, $t_{ab} = 0,60$ e $V_{ga} = V_{gb} = 0$. Todos os parâmetros estão expressos em unidades do gap supercondutor.

se a densidade de estados local dos pontos quânticos (LDOS). Na figura 4.4 são apresentadas as LDOS dos pontos quânticos a e b para diferentes valores de t_{ab} . Para $t_{ab} = 0,02$ os pontos quânticos estão fracamente acoplados de modo que a densidade de estados de cada um é dominada pelo acoplamento com os eletrodos correspondentes. No caso do ponto quântico a que está acoplado ao ferromagneto, a LDOS-A apresenta um pico com uma largura finita centrado em $\omega = 0$. Desde que o ponto quântico apresenta um nível degenerado em spin em $\omega = 0$, a LDOS para o ponto quântico isolado corresponderia a uma função delta centrada na origem. O acoplamento com o ferromagneto faz com que esta função delta apresente uma largura e altura finitas. Este alargamento está relacionado com a mistura ou hibridização do nível do ponto quântico com a banda contínua de estados do ferromagneto. Fisicamente isto representa a probabilidade finita do elétron deixar o ponto quântico tunelando para o ferromagneto.

Para o mesmo valor de $t_{ab} = 0,02$, LDOS-B apresenta um padrão distinto em comparação com LDOS-A. Existem dois picos estreitos em $\omega \approx \pm 0,35$. Estes picos estão relacionados com os níveis de Andreev do supercondutor os quais são simétricos e correspondem e estados de elétron e de buraco. À medida que t_{ab} aumenta, surgem dois picos adicionais no centro da LDOS-B, os quais são menos intensos em comparação com os níveis de Andreev que são os picos externos. Estes picos surgem devido ao acoplamento entre os pontos quânticos e correspondem aos chamados estados ligante e anti-ligante que surgem em moléculas diatômicas [66]. Isto também pode ser visto particularizando



Figura 4.4: (a) LDOS para o ponto quântico a para alguns valores de t_{ab} . (b) LDOS para o ponto quântico b para alguns valores de t_{ab} . Nota-se que para $t_{ab} \rightarrow 0$ a LDOS para cada ponto quântico é dominada pelos eletrodos aos quais estes estão acoplados. Parâmetros fixos: P = 0, $\Gamma_s = 1,00$, $\Gamma_1 = 0,10$ e $V_{ga} = V_{gb} = 0$. Todos os parâmetros estão expressos em unidades do gap supercondutor.

as equações (3.3.20) e (3.3.23) para o caso $\Gamma_1 = \Gamma_s = 0$. Neste caso, a densidade de estados de ambos os pontos quânticos pode ser escrita na forma,

LDOS-A = LDOS-B =
$$\frac{1}{2t_{ab}^2} [\delta(\omega - t_{ab}) + \delta(\omega + t_{ab})]$$

que corresponde a duas linhas localizadas em $\omega = \pm t_{ab}$.

A LDOS-A apresenta quatro picos de igual intensidade para $t_{ab} = 0, 30 \,\mathrm{e}\,0, 46$. Os dois picos centrais também surgem devido ao acoplamento com o ponto quântico *b* enquanto que os dois picos externos estão relacionados com os níveis de Andreev. Desde que cada um destes picos se mistura com a banda contínua do ferromagneto o resultado é uma distribuição uniforme de estados em cada um destes picos o que explica a igual intensidade dos mesmos. Isso não ocorre para o ponto quântico *b* devido a este estar fortemente ligado ao supercondutor que não apresenta um espectro contínuo como o ferromagneto resultando em uma estrutura assimétrica dos picos de LDOS-B.

Seguindo este raciocínio, uma maneira de reduzir a assimetria, seria aumentar o acoplamento com o ferromagneto e reduzir o acoplamento com o supercondutor de maneira que a hibridização com o espectro contínuo do ferromagneto também seja pronunciada no ponto quântico *b*. Conforme mostrado na figura 4.5, o forte acoplamento com o ferromagneto quase elimina a estrutura de picos para $\Gamma_1 = 0,90$, inclusive para o ponto quântico *b*. No entanto, a estrutura geral da LDOS-B apresenta uma simetria maior comparada com as curvas da figura 4.4.



Figura 4.5: (a) LDOS para o ponto quântico a para alguns valores de Γ_1 . (b) LDOS para o ponto quântico b para alguns valores de Γ_1 . O aumento do acoplamento com o ferromagneto elimina a estrutura de picos devido a hibridização dos estados discretos dos pontos quânticos com o espectro contínuo da banda do ferromagneto. Parâmetros fixos: P = 0, $\Gamma_s = 1,00$, $t_{ab} = 0,68$ e $V_{ga} = V_{gb} = 0$. Todos os parâmetros estão expressos em unidades do gap supercondutor.

As alterações na densidade local de estados dos pontos quânticos tem efeitos diretos sobre as propriedades de transporte do sistema. Isto pode ser verificado pelas curvas $I \times V$ mostradas na figura 4.6. À medida que o acoplamento com o ferromagneto aumenta a estrutura de platôs das curvas é eliminada e as curvas exibem uma variação contínua com o aumento do potencial aplicado. Isto deve-se ao fato da transmitância depender da densidade local de estados nos pontos quânticos o que pode ser notados das curvas de T_{AR} na figura 4.6b. Estas exibem picos nos mesmos valores de energia que ocorrem os picos das curvas de LDOS.

Vale notar ainda que a amplitude da corrente I aumenta significativamente com o aumento da constante de acoplamento Γ_1 . Isto deve-se ao fato desta constante representar a taxa na qual os elétrons do ferromagneto são injetados no ponto quântico. Portanto, um aumento de Γ_1 corresponde a um aumento da taxa de elétrons sendo injetados no ponto quântico. Além disso, o aumento do acoplamento com o ferromagneto implica em uma maior hibridização dos estados do ferromagneto e dos pontos quânticos e, portanto, em todo o intervalo do gap haverão estados disponíveis para que os elétrons sejam transferidos para o supercondutor.



Figura 4.6: (a) Curva $I \times V$ para alguns valores de Γ_1 . (b) Curvas de transmitância (T_{AR}) correspondentes. Nota-se que com o aumento de Γ_1 há um aumento quase contínuo da corrente e a estrutura de platôs é eliminada. Parâmetros fixos: P = 0, $\Gamma_s = 1,00$, $t_{ab} = 0,68$, $V_{ga} = V_{gb} = 0$. Todos os parâmetros estão expressos em unidades do gap supercondutor.

Efeitos da polarização

Nos resultados discutidos até o momento foi considerado que a polarização do ferromagneto era nula. No entanto, a polarização do ferromagneto apresenta um efeito importante sobre as propriedades de transporte do sistema. Desde que a corrente é oriunda do mecanismo de reflexão de Andreev, isto implica que um elétron com spin up é refletido como um buraco de spin down no eletrodo ferromagnético. Deste modo, é transferida uma carga igual ao dobro da carga do elétron na forma de um par de Cooper do supercondutor. Portanto, para haver transferência de carga para o supercondutor é necessário haver estados de spin down ocupados por elétrons no ferromagneto de modo que o buraco refletido possa ocupá-lo. Isso não é possível quando a polarização é igual à unidade, visto que todos os elétrons apresentam um tipo de spin e, desta forma, não existem estados disponíveis para o buraco refletido pelo supercondutor. Com isso, a reflexão de Andreev é proibida e a corrente é nula. Na figura 4.7 são mostradas algumas curvas de $I \times V$ para alguns valores de polarização e nota-se que ocorre uma redução gradativa da corrente com o aumento de P.

A necessidade de haver elétrons de dois tipos de spin para que ocorra condução neste sistema permite que a corrente elétrica seja controlada pela polarização do ferromagneto. Esta propriedade tem uma clara aplicação prática em spintrônica onde se deseja controlar correntes elétricas usando-se as propriedades de spin dos elétrons. No próximo capítulo, onde o sistema com dois ferromagnetos



Figura 4.7: (a) Curva $I \times V$ para alguns valores da polarização P. (b) Curvas de transmitância (T_{AR}) correspondentes. Nota-se que com o aumento de P ocorre uma redução da intensidade dos picos da transmitância e uma correspondente redução da amplitude da corrente. Parâmetros fixos: $\Gamma_1 = 0, 20, \Gamma_s = 1, 00,$ $t_{ab} = 0, 68, V_{ga} = V_{gb} = 0$. Todos os parâmetros estão expressos em unidades do gap supercondutor.

será considerado, esta propriedade será explorada com mais profundidade.

Potenciais de gate

Na ausência de potencial de gate os níveis dos pontos quânticos estão alinhados com o potencial químico do supercondutor $\mu_s = 0$. Aplicando-se os potenciais de gate V_{ga} e V_{gb} é possível desalinhálos de maneira arbitrária. Com isso, é introduzida uma segunda assimetria além da já existente devido ao acoplamento com os eletrodos. No entanto, a forma como estes potenciais podem afetar a corrente elétrica não pode ser determinada de maneira intuitiva devido mistura dos níveis dos pontos quânticos com os estados dos eletrodos.

A corrente I em função do potencial de gate é apresentada na figura 4.8a para diferentes valores do potencial V. Nota-se que a corrente é maxima quando a condição $V_{ga} = V_{gb} = 0$ é satisfeita; para valores positivos e negativos de V_{ga} , a corrente apresenta um decréscimo monotônico. Na figura 4.8b são apresentadas as curvas de $I \times V_{ga}$ para diferentes valores V_{gb} mantendo-se V = 0.90. Variando o potencial de gate no ponto quântico b a corrente é reduzida em relação ao caso $V_{gb} = 0$ e apresenta dois pontos de máximo cuja separação aumenta com V_{gb} . Os potenciais de gate atuam diretamente sobre os níveis do pontos quânticos afetando a hibridização destes com os estados dos eletrodos. Desta forma, os valores de energia para os quais ocorre interferência construtiva das funções de onda dos elétrons é modificada quando os potenciais de gate são aplicados. Sendo assim, as curvas



apresentadas nas figuras 4.8 podem ser entendidas considerando-se a LDOS dos pontos quânticos.

Figura 4.8: (a) Curvas $I \times V_{ga}$ para diferentes valores de V com $V_{gb} = 0$. Pode ser observado que o valor máximo da corrente ocorre para $V_{ga} = V_{gb} = 0$. (b) Curvas $I \times V_{ga}$ para diferentes valores de V_{gb} com V = 0,90. Para $V_{gb} \neq 0$ o pico de máximo se divide em dois picos cuja separação é maior para valores maiores de V_{gb} . Parâmetros fixos: $\Gamma_1 = 0,20$, $\Gamma_s = 0,50$, $t_{ab} = 0,30$ e P = 0,80. Todos os parâmetros estão expressos em unidades do gap supercondutor.

Tomando-se a curva para $V_{gb} = 0,80$ da figura 4.8b, os pontos de máximo encontram-se nos valores $V_{ga} = -0,63$ e $V_{ga} = +0,10$. Na figura 4.9 são apresentadas as curvas para LDOS para valores de V_{ga} adjacentes ao máximo da corrente em $V_{ga} = -0,63$. As curvas para ambos os pontos quânticos são similares: um conjunto de picos está localizado no intervalo $0,60 < \omega < 0,80$ para $V_{ga} > 0$ e em $-0,80 < \omega < -0,60$ para $V_{ga} < 0$. O efeito global da aplicação dos potenciais de gate é fazer com que os dois conjuntos de picos apresentem intensidades fortemente assimétricas. No caso da LDOS-A, os picos localizados no intervalo negativo de energias são reforçados enquanto que os picos da região positiva são suprimidos. Nas curvas da LDOS-B ocorre o contrário: os picos positivos são reforçados enquanto que o conjunto de picos da porção negativa do espectro são suprimidos. Desde que no processo de reflexão de Andreev um elétron com energia $+\omega$ é refletido como um buraco com energia $-\omega$, então ambos os conjuntos de picos irão participar do processo de transporte. Sendo assim, a condutividade do sistema será limitada pelos conjunto de picos suprimidos. Isso explica a sistemática redução da corrente com o aumento dos potenciais de gate.

Conforme pode ser observado da figura 4.9a, a distribuição de picos para $V_{ga} < 0$ torna-se mais localizada e a separação entre eles aumenta à medida que V_{ga} muda de -0,63 para -0,93. No detalhe da figura 4.9a é mostrada uma ampliação dos picos suprimidos da LDOS-A. Na curva para $V_{ga} = -0, 63$, existem três picos que estendem-se sobre o intervalo de $0, 60 < \omega < 0, 80$. A medida V_{ga} varia de -0,63 para -0,93, este padrão muda para um pico localizado em $\omega \approx 0, 68$. O resultado, portanto, é uma redução do intervalo de energia em que pode ocorrer a reflexão de Andreev implicando na redução da corrente elétrica de 0,11 para $V_{ga} = -0, 63$ para 0,02 em $V_{ga} = -0, 90$. O mesmo tipo de efeito pode ser observado na LDOS-B, onde os picos são deslocados para a extremidade do espectro e tornam-se mais estreitos de modo que o efeito global é uma redução da janela de energia onde a corrente elétrica é estabelecida.

O mesmo comportamento pode ser observado no segundo pico da corrente localizado em V_{ga} = +0,10 (curva para $V_{gb} = 0,80$ da figura 4.8b). As curvas da figura 4.10 mostram que o transporte eletrônico ocorre através de estados localizados em torno de $\omega = 0$. À medida que V_{ga} aumenta, o pico central é dividido em dois picos com intensidades diferentes reduzindo assim o número de estados disponíveis para o transporte. Além disso, os picos externos são deslocados em direção à borda do espectro à medida que V_{ga} aumenta. Desde que V = 0,90, para valores de $V_{ga} > 0,55$ estes picos ficam localizados para valores acima de 0,90 e não contribuem para a corrente. Estes dois efeitos explicam a redução contínua da corrente quando o potencial de gate V_{ga} aumenta de 0,1 para 0,90.

Os espectros da LDOS mostrados nas figuras 4.9 e 4.10 são bem diferentes mostrando que o potencial de gate tem fortes efeitos sobre a LDOS dos pontos quânticos. Através da variação do potencial de gate é possível modificar as regiões em energia onde ocorrem as ressonâncias o que pode ser usado para controlar a corrente elétrica nestes sistemas.



Figura 4.9: Curvas de LDOS correspondentes a curva da corrente elétrica para $V_{gb} = 0,80$ apresentada na figura 4.8b. (a) LDOS-A para valores de V_{ga} correspondentes ao ponto de máximo da corrente em $V_{ga} =$ -0,63. No detalhe é apresentada uma ampliação da região $0,60 < \omega < 0,80$. (b) Curvas correspondentes para LDOS-B. No detalhe é apresentada uma ampliação da região $-0,90 < \omega < -0,60$. Nota-se que aumentando V_{ga} o pico da LDOS localizado em $\omega \approx \pm 0,68$ é dividido em dois e a separação entres estes picos aumenta a medida V_{ga} tende para -0,90. Parâmetros fixos: $\Gamma_1 = 0,20$, $\Gamma_s = 0,50$, $t_{ab} = 0,30$, V = 0,90 e P = 0,80. Todos os parâmetros estão expressos em unidades do gap supercondutor.



Figura 4.10: Curvas de LDOS correspondentes a curva da corrente elétrica para $V_{gb} = 0,80$ apresentada na figura 4.8b. (a) LDOS-A para valores de V_{ga} correspondentes ao ponto de máximo da corrente em $V_{ga} = +0,10$. No detalhe é apresentada uma ampliação da região $-0,90 < \omega < 0,10$. (b) Curvas correspondentes para LDOS-B. No detalhe é apresentada uma ampliação da região $-0,90 < \omega < 0,10$. Nota-se que aumentando-se V_{ga} o pico central é dividido em dois e a separação entres estes picos aumenta a medida V_{ga} tende para 0,75. Parâmetros fixos: $\Gamma_1 = 0,20$, $\Gamma_s = 0,50$, $t_{ab} = 0,30$, V = 0,90 e P = 0,80. Todos os parâmetros estão expressos em unidades do gap supercondutor.

4.2 Resultados para o caso interagente

Os resultados apresentados a seguir referem-se ao estudo dos efeitos das interações sobre a corrente elétrica do sistema. Por simplicidade e clareza, as interações serão consideradas separadamente, ou seja, primeiramente será considerado o efeito da interação inter-pontos quânticos, descrita pela constante \mathcal{K} e depois o efeito da interação intra ponto quântico, caracterizada pela constante \mathcal{U} . Em princípio, em uma situação experimental ambas as interações estão presentes desde que são oriundas da correlação Coulombiana. Por esta razão, no final deste capítulo, serão apresentados alguns dados com ambas as interações presentes com uma configuração de parâmetros mais próxima da situação experimental.

É importante notar que não será considerado a ocorrência de ressonância Kondo nos pontos quânticos. Embora este efeito tenha sido observado experimentalmente em pontos quânticos semicondutores, o acoplamento do ponto quântico com o eletrodo ferromagnético leva a uma supressão do efeito do Kondo [94, 95]. Além disso, o pareamento eletrônico no supercondutor também compete com o efeito Kondo através do efeito de proximidade [96]. As interações intra e inter pontos quânticos são limitadas pelo valor do gap supercondutor, desde que o objetivo é observar os efeitos da corrente devido ao processo de reflexão de Andreev. Isso restringe os potenciais aplicados a valores muito pequenos, tipicamente da ordem de meV ou menores. Portanto, os resultados apresentados estão no regime de baixa correlação.

4.2.1 Efeitos da interação inter pontos quânticos (\mathcal{K})

Na figura 4.11a são apresentadas algumas curvas $I \times V$, para diferentes valores da interação interpontos quânticos. Estas curvas apresentam uma estrutura de platôs, como no caso não-interagente relacionados com a estrutura de picos da LDOS dos pontos quânticos. Quando a interação é ligada e aumentada, o valor do platô máximo é reduzido de I = 0,90 para $\mathcal{K} = 0$ até I = 0,30 para $\mathcal{K} = 0,45$, desde que valores mais elevados da interação implicam em uma repulsão Coulombiana maior entre os pontos quânticos. Para valores pequenos do potencial aplicado (eV < 0,30) esta tendência é invertida apesar de ser um efeito muito pequeno. Na figura 4.11b, são mostradas as curvas correspondentes da condutância diferencial as quais permitem uma melhor resolução das curvas $I \times V$. A estrutura simétrica para $\mathcal{K} = 0$ é quebrada quando $\mathcal{K} \neq 0$, a assimetria tornado-se mais pronunciada para valores mais altos de \mathcal{K} . Em alguns exemplos da figura 4.11b, regiões de condutância diferencial negativa (CDN) aparecem para \mathcal{K} em torno de 0,60, Dos cálculos numéricos realizados, a CDN está presente no intervalo $0,08 < \mathcal{K} < 0,4$. Para \mathcal{K} maior que 0,4, a CDN é suprimida e um pico positivo emerge nas curva de dI/dV, conforme pode ser observado na curva para $\mathcal{K} = 0,45$.

Dos resultados apresentados na figura 4.11, conclui-se que o mecanismo de surgimento da CDN não está linearmente relacionado com o efeito de bloqueio de Coulomb [81–84]. A interação \mathcal{K} exerce um efeito mais sutil mudando a transmitância do sistema. Com efeito, observando-se as curvas de dI/dV, nota-se quando a interação é elevada, o segundo pico para eV > 0 é suprimido. Desta forma, para alguns valores de \mathcal{K} ocorre uma supressão de alguns dos picos resonantes causando uma redução adicional da transmitância para alguns valores do potencial aplicado. Este efeito faz com que a condutância diferencial assuma valores negativos.



Figura 4.11: Corrente vs. potencial aplicado para alguns valores de K. (a) Curvas $I \times V$. (b) Curvas de condutância diferencial correspondentes, mostrando regiões com valores negativos. Parâmetros fixos: $\Gamma_1 = 0, 19, \Gamma_s = 0, 40, t_{ab} = 0, 5, P = 0, 3, U = 0, k_BT = 0, 01$ and $eV_{ga} = eV_{gb} = 0$. Todos os parâmetros estão expressos em unidades do gap supercondutor.

A transmitância é apresentada nas figuras 4.12a e 4.12b. Há uma variação das curvas com o potencial aplicado em constraste com o caso não-interagente onde a transmitância independe do valor de V. A interação \mathcal{K} acopla os números de ocupação nos pontos quânticos, o que implica em uma dependência não trivial da transmitância com o potencial aplicado. Na figura 4.12a são mostradas as curvas para T_{AR} com $\mathcal{K} = 0,22$ fixo para diferentes valores de V. Como pode ser claramente observado, há uma redução da amplitude de T_{AR} com o aumento do potencial mas o espectro permanece simétrico com respeito a ω . Na figura 4.12b, são mostradas as curvas para T_{AR} com eV = 0,99 para vários valores de \mathcal{K} . Nestas curvas pode-se observar novamente uma redução da transmitância e um deslocamento dos picos. No entanto, a variação não é sistemática como pode ser verificado pela curva para $\mathcal{K} = 0,45$ a qual não segue a mesma tendência das demais. A redução gradual da transmitância com o aumento do potencial aplicado é uma das causas da CDN.



Figura 4.12: (a) Transmitância Andreev (T_{AR}) para $\mathcal{K} = 0, 22$. (b) Transmitância Andreev (T_{AR}) para eV = 0, 99. Parâmetros fixos: $\Gamma_1 = 0, 19$, $\Gamma_s = 0, 40$, $t_{ab} = 0, 5$, P = 0, 3, $\mathcal{U} = 0$, $k_BT = 0, 01$ $eV_{ga} = eV_{gb} = 0$. Todos os parâmetros estão expressos em unidades do gap supercondutor.

A ausência da CDN para valores negativos do potencial aplicado sugere que existem ingredientes adicionais para explicar este efeito. Um fator importante é a assimetria na LDOS a qual aparece quando a interação \mathcal{K} é ligada. Nas figuras 4.13a e 4.13b o efeito da interação sobre a estrutura de picos da LDOS é mostrado. A forma simétrica vista nas figuras 4.5 e 4.4 é perdida quando a interação é incluída. Aumentando-se os valores de \mathcal{K} em direção ao valor do gap supercondutor, alguns picos são suprimidos (um central e um externo) e outros são reforçados (um central e outro externo). Além disso, a LDOS apresenta um caráter mais localizado desde que os picos tornam-se mais estreitos. Os picos centrais da LDOS estão associados com estados ressonantes entre os pontos quânticos, enquanto que os picos externos são oriundos do acoplamento com o supercondutor. A simetria é crítica para permitir a transferência de elétrons através da nanoestrutura desde que a soma das energias dos elétrons disponíveis para formar o par de Cooper deve ser igual ao potencial químico do supercondutor (o qual é igual a zero). Portanto, a corrente é otimizada quando os picos da LDOS são simétricos e a supressão de um destes picos causa uma redução efetiva da corrente com a eventual emergência do efeito CDN.



Figura 4.13: LDOS para diferentes valores da interação K. (a) LDOS para o ponto quântico a, acoplado ao ferromagneto. (b) LDOS para o ponto quântico b acoplado ao supercondutor. Em ambos a interação introduz uma assimetria relacionada com o efeito CDN. Parâmetros fixos: $\Gamma_1 = 0, 19, \Gamma_s = 0, 40, t_{ab} = 0, 5, P = 0, 3, U = 0, k_BT = 0,01, eV = +0,62 e eV_{ga} = eV_{gb} = 0$. Todos os parâmetros estão expressos em unidades do gap supercondutor.

Para verificar que a CDN também está relacionada com a assimetria da LDOS, as curvas para $\mathcal{K} = 0, 22$ da figura 4.11 foram recalculadas, para o caso em que o potencial de gate no ponto quântico a é aplicado enquanto que o potencial de gate no ponto quântico b é mantido fixo em $V_{gb} = 0$. Os resultados são qualitativamente similares se V_{gb} é variado mantendo-se $V_{ga} = 0$. Conforme mostrado nas figuras 4.14a e 4.14b, a CDN aparece para valores negativos de V quando V_{ga} varia de -0, 26 a -0, 39. No intervalo $-0, 13 < V_{ga} < +0, 13$, a CDN aparece para V > 0. Para fazer contato com a assimetria da LDOS, nas figuras 4.15a e 4.15b, são mostradas as LDOS para o ponto quântico b para valores adjacentes ao pico negativo da condutância diferencial. A LDOS para o ponto quântico a apresenta uma forma similar. Variando o potencial de gate V_{ga} é possível mudar a amplitude e posição dos picos na LDOS. Na figura 4.15a há uma forte supressão do pico localizado em $\omega = -0, 37$. Esta redução corresponde aos valores negativos da dI/dV. Na figura 4.15b, são mostradas as curvas de LDOS-B para a CDN ocorrendo em V > 0. Nota-se agora que o pico suprimido está localizado em $\omega = +0, 37$. Desta forma, existe uma relação direta entre a localização do pico mais suprimido da LDOS e o sinal do potencial V onde ocorre a CDN.

As figuras 4.14 e 4.15 corroboram a função da LDOS no surgimento de regiões negativas na condutância diferencial. Com efeito, os picos da LDOS e da transmitância são ressonâncias resul-



Figura 4.14: Corrente e condutância diferencial para alguns valores do potencial de gate V_{ga} . (a) Corrente. (b) Condutância diferencial. Parâmetros fixos: $\Gamma_1 = 0, 2, \Gamma_s = 0, 4, t_{ab} = 0, 50, P = 0, 3, \mathcal{K} = 0, 22, \mathcal{U} = 0, k_BT = 0, 01 \ e \ V_{gb} = 0.$



Figura 4.15: LDOS do ponto quântico b para alguns valores do potencial de gate V_{ga} . (a) LDOS-B para eV = -0, 61. O segundo pico é progressivamente suprimido e desaparece para $eV_{ga} = -0, 39$. (b) LDOS-B para eV = +0, 62. O primeiro pico para energia positiva, que estava ausente para $eV_{ga} = 0$, emerge com a aplicação do potencial de gate. Parâmetros fixos: $\Gamma_1 = 0, 2$, $\Gamma_s = 0, 4$, $t_{ab} = 0, 50$, P = 0, 3, $k_BT = 0, 01$, $V_{gb} = 0$, $\mathcal{K} = 0, 22$ e $\mathcal{U} = 0$. Todos os parâmetros estão expressos em unidades do gap supercondutor.

tantes do acoplamento entre os pontos quânticos e os eletrodos. Como mostrado nas figuras 4.12 e 4.13, a interação inter pontos quânticos afeta a LDOS e a transmitância de maneira similar a uma "interferência destrutiva", mudando a posição e amplitude dos picos. É possível sintonizar a região onde tal "interferência destrutiva" ocorre através de potenciais de gate modificando os valores do potencial aplicado onde a CDN irá ocorrer, conforme mostrado nas figuras 4.14 e 4.15. Esta possibilidade de controlar a região onde ocorre a CDN pode ser útil em aplicações práticas.

4.2.2 Efeitos da interação intra-pontos quânticos

No que segue, são apresentados os resultados para o caso que a interação intra-pontos quânticos \mathcal{U} é ligada mantendo-se a interação inter-pontos quânticos igual a zero ($\mathcal{K} = 0$). Conforme fica evidente da equação (3.1.8) do capítulo 3, a interação \mathcal{U} separa os estados de spin up e spin down em cada ponto quântico implicando em uma divisão dos picos da transmitância e condutância diferencial.



Figura 4.16: Corrente e condutância diferencial em função do potencial aplicado para alguns valores da interação \mathcal{U} . (a) Corrente vs. potencial aplicado. (b) Condutância diferencial. A interação \mathcal{U} levanta a degenerescência de spin produzindo uma divisão dos picos nas curvas dI/dV. Parâmetros fixos: $\Gamma_1 = 0, 1, \Gamma_s = 1.00, t_{ab} = 0,50, P = 0,80, \mathcal{K} = 0, k_BT = 0,01$ e $eV_{ga} = eV_{gb} = 0$.

No entanto, este efeito pode ser observado apenas quando as ocupações de spin up e spin down são diferentes. Esta condição é satisfeita para valores não-nulos da polarização do ferromagneto, quando diferentes números de elétrons com spin up e spin down são injetados nos pontos quânticos. As taxas de injeção são $\Gamma_{1\uparrow}/h = \Gamma_1(1+P)/h \in \Gamma_{1\downarrow}/h = \Gamma_1(1-P)/h$, para elétrons com spin up e spin down, respectivamente. Na figura 4.16 algumas curvas $I \times V$ e a correspondente condutância diferencial são apresentadas, para diferentes valores da interação \mathcal{U} . Tão logo $U \neq 0$, os picos começam a se dividir e para $\mathcal{U} = 0,90$ a condutância diferencial apresenta um claro padrão de oito picos. A curva $I \times V$, para $\mathcal{U} = 0,90$, também apresenta um número adicional de platôs e uma amplitude máxima reduzida em comparação com o caso $\mathcal{U} = 0$. Esta redução ocorre devido a supressão do número de estados disponíveis nos pontos quânticos com o aumento da interação.

Nos exemplos apresentados na figura 4.16, os quais foram calculados com P = 0,90, o efeito de CDN está ausente. Aumentando-se a polarização a região de CDN é reduzida e eventualmente desaparece quando a polarização se aproxima da unidade. O mecanismo que justifica o efeito de CDN para interação intra-ponto quântico é o mesmo que foi apresentado para o caso da interação \mathcal{K} : a redução da transmitância com o potencial aplicado combinada com as assimetrias da densidade de estados dos pontos quânticos. Para valores da polarização próximos da unidade, o número médio de elétrons participando do processo de condução é tão reduzido que uma redução do número de estados não implica em uma redução da corrente elétrica. Esta é a causa da ausência da CDN nos exemplos mostrados na figura 4.16.

4.2.3 Resultados para $\mathcal{U} \neq 0$ e $\mathcal{K} \neq 0$

Nas últimas seções os resultados apresentados apresentavam uma das interações desligada. Entretanto, o caso de maior relevância experimental é quando ambas interações são ativas. Na figura 4.17 são mostradas algumas curvas para $\mathcal{U} = \mathcal{K} = 0, 25$. Embora os valores de polarização sejam altos $P = 0,30 \,\mathrm{e}\,0,80$, existem algumas regiões de CDN em todas as curvas. Para $V_{ga} = -0, 39 \text{ e } V_{gb} = -0, 10 \text{ a CDN}$ aparece para valores negativos do potencial aplicado $eV \lesssim -0, 48$ (figuras 4.17a e 4.17b). Para $eV_{ga} = eV_{gb} = -0, 13$, (figuras 4.17c e 4.17d) a CDN aparece para $eV \gtrsim 0,48$. Além das interações e dos valores dos potenciais de gate, outra diferença em relação as curvas da figura 4.16 são os valores das constantes de acoplamento $t_{ab} \in \Gamma_s$. Alterando-se os valores destas constantes, é possível fazer com que alguns picos da LDOS sejam pequenos de modo a fazer com que a corrente seja sensível à redução dos estados mesmo em polarizações próximas de 1 e o efeito CDN é recuperado. Com efeito, para os casos correspondentes das figuras 4.17c e 4.17d, a LDOS apresenta alguns picos quase totalmente suprimidos. Um exemplo é apresentado nas figuras 4.18a e 4.18b onde a LDOS é mostrada para P = 0, 80. Com o aumento do potencial aplicado, ocorre uma supressão do primeiro e terceiro picos localizados em $\omega = -0,54$ e $\omega = 0,23$, respectivamente. A supressão do primeiro pico da LDOS-A e do terceiro picos da LDOS-B é quase completa para eV = 0,57 e eV = 0,83. Desde que a reflexão de Andreev requer um par de canais simétrico para conduzir a corrente, o processo é dominado por estes picos suprimidos permtindo observar a CDN para valores elevados de P.



Figura 4.17: Corrente e condutância diferencial em função do potencial aplicado para diferentes valores da polarização do ferromagneto. Figuras (a) e (b): $V_{ga} = -0,39$ e $V_{gb} = -0,10$. Figuras (c) e (d) $V_{ga} = V_{gb} = -0,13$. O aumento da polarização suprime a CDN reduzindo-se o número de elétrons no processo de condução. Parâmetros fixos: $\Gamma_1 = 0,20$, $\Gamma_s = 0,26$, $t_{ab} = 0,40$, $\mathcal{K} = 0,25$, $\mathcal{U} = 0,25$ e $k_BT = 0,01$.



Figura 4.18: LDOS correspondentes para alguns valores do potencial aplicado. Ajustando parâmetro de "hopping" t_{ab} e o acoplamento com o supercondutor Γ_s , é possível reduzir os picos da LDOS permitindo observar a CDN mesmo para valores altos da polarização. (a) LDOS para o ponto quântico a. (b) LDOS para o ponto quântico b. Parâmetros fixos: $P = 0, 80, \Gamma_1 = 0, 20, \Gamma_s = 0, 26, t_{ab} = 0, 40, \mathcal{K} = 0, 25, \mathcal{U} = 0, 25, k_BT = 0, 01 e V_{ga} = V_{gb} = -0, 13$. Todos os parâmetros estão expressos em termos do gap supercondutor.

Resultados para o sistema $(F_1, F_2) - PQ_a - PQ_b - S$

Neste capítulo serão apresentados os resultados para o sistema completo $(F_1, F_2) - PQ_a - PQ_b - S$ considerando-se as propriedades mais relacionadas com o processo não-local de reflexão de Andreev cruzada. Desde que existem dois eletrodos ferromagnéticos, é possível definir uma magnetoresistência para comparar as situações em que as magnetizações dos eletrodos estão orientadas paralelamente e anti-paralelamente. Como foi feito no capítulo 4, primeiramente serão consideradas as propriedades de equilíbrio, em zero-bias, e a seguir, as propriedades sob potencial aplicado.

5.1 Resultados para o caso não-interagente

5.1.1 Condutância em zero bias

Considerando o limite $eV_1 = eV_2 = 0^+$ nas equações (3.3.4) e (3.3.9), segue que:

$$G_1 = \frac{2e^2}{h} \left[A_{11}(0) + A_{12}(0) \right]$$
(5.1.1)

para o eletrodo F_1 e

$$G_2 = \frac{2e^2}{h} \left[A_{22}(0) + A_{21}(0) \right]$$
(5.1.2)

para o eletrodo F_2 .

Usando-se os valores das amplitudes em $\omega = 0$, pode-se escrever a condutância total do sistema da seguinte forma:

$$G(\tilde{P}, \tilde{r}) = G_1 + G_2 = \frac{16e^2}{h} \frac{\tilde{r}^2(1 - \tilde{P}^2)}{(1 - \tilde{P}^2 + \tilde{r}^2)^2}.$$
(5.1.3)

onde a razão de acoplamento \tilde{r} é definida da seguinte forma,

$$\tilde{r} = \frac{\Gamma_R}{\Gamma_L}$$

 com

$$\Gamma_L = \Gamma_1 + \Gamma_2$$
 and $\Gamma_R = \frac{4t_{ab}^2}{\Gamma_s}$

Além disso, foi definido,

$$\tilde{P} = \frac{\left[(\Gamma_1 P_1)^2 + (\Gamma_2 P_2)^2 + 2\Gamma_1 P_1 \Gamma_2 P_2 \cos\theta\right]^{1/2}}{\Gamma_1 + \Gamma_2}.$$
(5.1.4)

A condutância de cada eletrodo pode ser escrita usando-se a definição de \tilde{P} . Para o eletrodo F_1 , a condutância G_1 pode se escrita da seguinte forma,

$$G_{1} = G \frac{\Gamma_{1}^{2} + \Gamma_{2}\Gamma_{1} - (P_{1}^{2}\Gamma_{1}^{2} + \Gamma_{1}P_{1}\Gamma_{2}P_{2}\cos\theta)}{\Gamma_{1}^{2} + \Gamma_{2}^{2} + 2\Gamma_{2}\Gamma_{1} - (\Gamma_{1}^{2}P_{1}^{2} + \Gamma_{2}^{2}P_{2}^{2} + 2\Gamma_{1}P_{1}\Gamma_{2}P_{2}\cos\theta)}$$
(5.1.5)

e para o eletrodo F_2 tem-se ainda:

$$G_{2} = G \frac{\Gamma_{2}^{2} + \Gamma_{2}\Gamma_{1} - (P_{2}^{2}\Gamma_{2}^{2} + \Gamma_{1}P_{1}\Gamma_{2}P_{2}\cos\theta)}{\Gamma_{1}^{2} + \Gamma_{2}^{2} + 2\Gamma_{2}\Gamma_{1} - (\Gamma_{1}^{2}P_{1}^{2} + \Gamma_{2}^{2}P_{2}^{2} + 2\Gamma_{1}P_{1}\Gamma_{2}P_{2}\cos\theta)}.$$
(5.1.6)

Para verificar melhor o efeito da introdução do segundo ferromagneto ao sistema, será considerado o caso em que $P_1 = P_2 = P \ e \ \Gamma_1 = \Gamma_2$. Neste caso a equação (5.1.4) se reduz a $\tilde{P} = P \cos(\theta/2)$ de modo que a orientação relativa das magnetizações dos ferromagnetos desempenha um papel semelhante ao da polarização para o sistema com apenas um eletrodo. Desta forma, a combinação de dois ferromagnetos atua como um ferromagneto efetivo cuja polarização é controlada pelo ângulo θ . Na figura 5.1 é mostrada a condutância total G dada por (5.1.3) em função do ângulo θ para diferentes valores da polarização P. Nota-se que de modo geral ocorre um aumento de G à medida que o ângulo θ se aproxima de π . Este aumento é explicado pela contribuição do processo de reflexão de Andreev cruzada (RAC) que é máxima quando $\theta = \pi$. Este efeito também pode ser observado pela sensibilidade da condutância com o ângulo θ que aumenta à medida que $P \rightarrow 1$. Aqui como no caso com apenas um eletrodo (figura 4.2), existe um valor de \tilde{P} tal que G é máxima quando a condição $\tilde{P}^2 + \tilde{r}^2 = 1$ é satisfeita. Desta forma, quando $\tilde{r} = 1$ como mostrado na figura 5.1a, a condutância aumenta de maneira monotônica, porém quando $\tilde{r} < 1$ (figura 5.1b) existe um valor de \tilde{P} que satisfaz a condição resultando em um máximo para um valor de $\theta < \pi$.

Na figura 5.2a são mostradas algumas curvas para a condutância G_1 em função de θ para alguns valores da polarização P_2 . Desde que a polarização do ferromagneto 1 é fixa em $P_1 = 1$, então G_1 é determinada pela RAC. Desde que este processo acopla os eletrodos ferromagnéticos, a variação de $G_1 \operatorname{com} \theta$ depende da polarização do ferromagneto 2. Quando $P_2 = 0$, a condutância G_1 permanece



Figura 5.1: Condutância em zero bias em função do ângulo θ para diferentes valores da polarização dos ferromagnetos ($P = P_1 = P_2$). (a) Resultados para $\tilde{r} = 1$. (b) Resultados para $\tilde{r} > 1$.



Figura 5.2: (a) Condutância do eletrodo F_1 em função do ângulo θ para diferentes valores de P_2 . (b) Magnetoresistência por reflexão de Andreev (ARMR) em função da polarização dos ferromagnetos ($P = P_1 = P_2$) para diferentes valores da razão de acoplamento \tilde{r} .

constante desde que a variação de θ não muda a magnetização de F_2 quando este encontra-se despolarizado. Quando P_2 aumenta, a condutância é reduzida para valores de $\theta \approx 0$ e cresce com à medida que $\theta \to \pi$. O resultado da figura 5.2 pode ser interessante do ponto de vista prático pois mostra que medindo-se a condutância G_1 de um ferromagneto conhecido é possível determinar a polarização de um segundo ferromagneto.

Os resultados mostrados até o momento indicam que a condutância do sistema é maior na configuração anti-paralela. Esta é uma particularidade deste sistema e é um comportamento contrário ao observado em outros sistemas magnéticos que apresentam efeitos de GMR e TMR [97,98]. Para fazer uma análise comparativa da condutância nas configurações paralela e anti-paralela, é interessante definir a magnetoresistência por reflexão de Andreev (ARMR) da seguinte maneira:

$$ARMR = \frac{G_{AP} - G_P}{G_{AP} + G_P} \tag{5.1.7}$$

onde $G_{AP} = G(\theta = \pi)$ é condutância quando os eletrodos apresentam magnetização anti-paralela e $G_P = G(\theta = 0)$ quando as magnetizações dos eletrodos estão alinhadas paralelamente.

Na figura 5.2b algumas curvas da ARMR em função da polarização dos ferromagnetos são apresentadas. Nota-se que o sinal da ARMR muda de acordo com a razão de acoplamento \tilde{r} . A condutância G_P depende fortemente da polarização desde que a reflexão de Andreev requer elétrons de dois tipos de spin do mesmo ferromagneto. Com efeito, no caso em que $P_1 = P_2 = P$, a polarização efetiva dos ferromagnetos é $\tilde{P} = P \cos(\theta/2)$ de modo que no caso paralelo $\tilde{P} = P$, assim:

$$G_P = \frac{16e^2}{h} \frac{\tilde{r}^2(1-P^2)}{(1-P^2+\tilde{r}^2)^2}$$

Com isso, à medida que a polarização dos eletrodos aumenta ocorre uma redução da condutância G_P à medida que $P \rightarrow 1$. No entanto, quando $\tilde{r} < 1$ existe um valor de P que maximiza a condutância G_P (figura 5.1b) e nesta condição G_P supera G_{AP} para a maior parte dos valores da polarização. Ao mesmo tempo, a condutância G_{AP} depende apenas das constantes de acoplamento de modo que valores pequenos de \tilde{r} implicam em uma forte redução de G_{AP} . Com efeito, para a configuração anti-paralela $\tilde{P} = 0$, de modo que:

$$G_{AP} = \frac{16e^2}{h} \frac{\tilde{r}^2}{(1+\tilde{r}^2)^2}$$

e assim, $G_{AP} \rightarrow 0$ quando $\tilde{r} \rightarrow 0$.

5.1.2 Resultados para bias finita

Para valores finitos do potencial, a função das constantes de acoplamento alteram de maneira não-trivial a estrutura da LDOS dos pontos quânticos. A corrente elétrica é fortemente dependente da simetria entre os picos da LDOS localizados simetricamente em relação a $\omega = 0$. Conforme discutido no capítulo 3, a corrente total *I* que entra no supercondutor é dada pela soma das correntes I_1 , oriunda do ferromagneto 1, e I_2 oriunda do ferromagneto 2. No caso específico em que as polarizações P_1 e P_2 são iguais a unidade e as magnetizações estão orientadas na configuração antiparalela, I_1 e I_2 devem ser correntes de spin puro de modo que a corrente total que entra no supercondutor seja completamente despolarizada. Como conseqüência, a dependência da corrente com as constantes de acoplamento e com os potenciais externos V_1 e V_2 não é direta, i.e., o aumento de um dos potenciais em relação ao outro não implica em um aumento imediato da corrente elétrica dos eletrodos individuais. Os eletrodos devem cooperar entre si de maneira que a soma das correntes I_1 e I_2 seja convertida em pares de Cooper singletos do supercondutor. Na figura 5.3a é mostrada a corrente I_1 em função dos potenciais V_1 e V_2 onde percebe-se claramente a estrutura de platôs relacionada com os picos discretos da LDOS dos pontos quânticos. Na figura 5.3b é mostrada a projeção da superfície da corrente no plano (V_1, V_2). A escala de cor determina o valor da corrente elétrica. Conforme pode ser observado da figura 5.3b, para valores positivos do potencial V_1 situado no III quadrante, I_1 apresenta valores negativos. O mesmo comportamento é observado para a corrente total $I = I_1 + I_2$. Este é um efeito peculiar desde que intuitivamente para $V_1 > 0$ espera-se que I_1 seja positivo. O fato de I_1 ser constituída por elétrons de spin up e a corrente I_2 por elétrons de spin down, implica que o sinal da corrente elétrica é determinada pelo valor médio dos potenciais $V_1 \in V_2$.



Figura 5.3: (a) Corrente I_1 em função dos potenciais aplicados $V_1 e V_2$. (b) Projeção da superfície no plano (V_1, V_2) onde fica claro no terceiro (III) quadrante que a corrente $I_1 < 0$ para $V_1 > 0$. Esta característica é resultante do requerimento da corrente no supercondutor ser despolarizada para qualquer valor de potencial aplicado. Parâmetros fixos: $\Gamma_1 = \Gamma_2 = 0,05$, $\Gamma_s = 1,0$, $t_{ab} = 0,50$, $P_1 = P_2 = 1,0$, $k_BT = 0,01$, $V_{ga} = V_{gb} = 0$, $\mathcal{K} = \mathcal{U} = 0$. Todos os parâmetros estão expressos em unidades do gap supercondutor.

A seguir será considerada a magnetoresistência do sistema na presença de potencial aplicado. Para isso, a definição (5.1.7) deve ser reformulada em termos das correntes $I_P \in I_{AP}$. Devido ao sinal da corrente ser determinada pela média dos potenciais $V_1 \in V_2$, então a magnetoresistência é definida da seguinte forma:

$$ARMR = \frac{|I_{AP}| - |I_P|}{|I_{AP}| + |I_P|}.$$
(5.1.8)

A definição (5.1.8) é diferente da usual devido ao uso do valor absoluto da corrente. A equação (5.1.8) permite comparar o valor das correntes I_P e I_{AP} mesmo nos casos em que se considera ARMR em função dos potenciais V_1 e V_2 .

Na figura 5.4 são apresentadas algumas curvas de ARMR para diferentes valores do parâmetro de hopping t_{ab} e do potencial V_1 . O potencial no eletrodo F_2 é mantido fixo em 0,20. O comportamento da ARMR para valores pequenos de t_{ab} e V_1 é similar ao que ocorre em zero-bias, i.e., a ARMRmuda de valores negativos para valores positivos à medida que a razão $\tilde{r} = \Gamma_R/\Gamma_L$ é aumentada para valores maiores do que a unidade.

Com efeito, a transição para valores positivos ocorre para $t_{ab} = 0,50$ para o qual $\tilde{r} = 1$. Apesar disso é possível obter valores positivos em todas as curvas para $V_1 = 0, 30$. Para $t_{ab} = 0, 20$ a razão de acoplamento é 0,10 o que é muito pequeno comparada com a unidade. Isto mostra que para $V_1 > 0,30$ o transporte é dominado pelas propriedades de não-equilíbrio e o parâmetro de zero-bias \tilde{r} é inapropriado para descrever a ARMR. Para entender o comportamento da magnetoresistência deste sistema, na figura 5.5 são apresentadas algumas curvas para a transmitância para reflexão de Andreev direta no eletrodo F_1 . Curvas semelhantes são obtidas para a transmitância no eletrodo F_2 . Desde que não há interação nos pontos quânticos as curvas da figura 5.5 são válidas para todo o intervalo de potencial aplicado. Na figura 5.5a são apresentadas algumas curvas de transmitância para diferentes valores da polarização enquanto t_{ab} é mantido fixo em 0,10. O aumento da polarização causa uma redução da amplitude dos picos da transmitância o que implica em uma redução da contribuição da reflexão de Andreev direta para a corrente I_P . Portanto, a magnetoresitência é levada a valores positivos com o aumento da polarização. O efeito torna-se mais pronunciado com o aumento do potencial aplicado desde que neste caso a corrente I_{AP} irá se tornar cada vez maior em comparação com a corrente I_P . Na figura 5.5b, são mostradas algumas curvas da transmitância para diferentes valores do parâmetro de hopping, t_{ab} . Quando $t_{ab} = 0, 10$ exitem dois picos estreitos localizados em $\omega = \pm 0,35$. À medida que o hopping é aumentado os picos vão tornando-se mais largos de modo que a transmitância seja diferente de zero em quase todo o gap supercondutor. O

mesmo resultado é observado para a transmitância por RAC de modo que um pequeno aumento no potencial implica em um aumento nas correntes I_{AP} e I_P . Desde que I_P é fortemente reduzida com a polarização o resultado é que a magnetoresistência apresenta valores positivos para pequenos valores do potencial aplicado.



Figura 5.4: Magnetoresistência (ARMR) em função da polarização para diferentes valores do potencial aplicado em F_1 . (a) $t_{ab} = 0, 10$. (b) $t_{ab} = 0, 20$. (c) $t_{ab} = 0, 25$. (d) $t_{ab} = 0, 30$. (e) $t_{ab} = 0, 40$. (f) $t_{ab} = 0, 80$. Parâmetros fixos: $\Gamma_1 = \Gamma_2 = 0, 50, \Gamma_s = 1, 0, P_1 = 1, 00, P_2 = 0, 95, k_BT = 0, 01, V_{ga} = V_{gb} = 0, V_2 = 0, 20,$ $\mathcal{K} = \mathcal{U} = 0$. Todos os parâmetros estão expressos em unidades do gap supercondutor.

Os resultados da figura 5.5 mostram que a variação do sinal da magnetoresistência pode ser entendida considerando a estrutura interna dos pontos quânticos para valores finitos do potencial. No intervalo $-0, 30 < V_1 < 0, 30$ a probabilidade de tunelamento é muito pequena e o sinal da magnetoresistência pode ser determinado através da relação entre as constantes de acoplamento. Portanto, neste intervalo de energia o sistema se comporta como uma junção ferromagnética/supercondutora onde os pontos quânticos exercem a função da barreira de potencial. Quando o potencial cresce e atinge as ressonâncias, a transmitância do sistema aumenta rapidamente e a resposta do sistema é dominada pela supressão destes picos com o aumento da polarização.

A seguir será considerada a dependência da ARMR com os potenciais aplicados mudando-se as constantes de acoplamento com o ferromagnetos. Na figura 5.6 são mostradas algumas curvas



Figura 5.5: (a) Transmitância para diferentes valores da polarização para $t_{ab} = 0, 10$. (b) Transmitância para diferentes valores de t_{ab} para P = 0, 06. Parâmetros fixos: $\Gamma_1 = \Gamma_2 = 0, 50, \Gamma_s = 1, 0, k_B T = 0, 01,$ $V_{ga} = V_{gb} = 0, V_1 = 0, 06, V_2 = 0, 20, \mathcal{K} = \mathcal{U} = 0$. Todos os parâmetros estão expressos em unidades do gap supercondutor.

de ARMR em função do potencial V_1 para diferentes valores de V_2 . Também são mostradas as curvas correspondentes para as correntes $I_P \in I_{AP}$. São considerados três casos diferentes: $\Gamma_1 =$ Γ_2 , $\Gamma_1 > \Gamma_2 \in \Gamma_1 < \Gamma_2$. Conforme pode ser claramente observado nas figuras 5.6d, 5.6e e 5.6f, a constante Γ_1 limita a amplitude da corrente I_P e a constante Γ_2 desloca a corrente I_P ao longo do eixo da corrente. A corrente I_{AP} por outro lado é independente da mudança das constantes de acoplamento. Isto é explicado pelo valor da polarização o qual é igual a 0,95 para ambos os eletrodos. Neste caso a corrente I_{AP} é dada pelo processo de RAC no qual é retirado um elétron de spin up de F_1 e outro elétron de spin down de F_2 . Desde que a corrente total deve ser despolarizada devido ao supercondutor, a corrente I_{AP} é limitada pelo eletrodo com o menor valor da constante de acoplamento. Com isso, a magnetoresistência segue as variações da corrente na configuração paralela.

Da definição (5.1.8), $|I_{AP}| > |I_P|$ corresponde a valores positivos da magnetoresistência. Quando a polarização está próxima da unidade, a situação usual é encontrar valores positivos de ARMRdesde que a corrente I_{AP} é constituída pelo processo de RAC além do processo de reflexão de Andreev normal o qual é o único processo presente na corrente I_P . Com efeito, conforme mostrado



Figura 5.6: ARMR em função do potencial V_1 para diferentes valores do potencial V_2 : (a) $\Gamma_1 = \Gamma_2 = 0,50$ (b) $\Gamma_1 = 0,80$ e $\Gamma_2 = 0,20$ (c) $\Gamma_1 = 0,20$ e $\Gamma_2 = 0,80$. Corrente para a configuração paralela dos ferromagnetos: (d) $\Gamma_1 = \Gamma_2 = 0,50$ (e) $\Gamma_1 = 0,80$ e $\Gamma_2 = 0,20$ (f) $\Gamma_1 = 0,20$ e $\Gamma_2 = 0,80$. Corrente para a configuração anti-paralela dos ferromagnetos: (g) $\Gamma_1 = \Gamma_2 = 0,50$ (h) $\Gamma_1 = 0,80$ e $\Gamma_2 = 0,20$ (i) $\Gamma_1 = 0,20$ e $\Gamma_2 = 0,80$. Corrente para a configuração anti-paralela dos ferromagnetos: (g) $\Gamma_1 = \Gamma_2 = 0,50$ (h) $\Gamma_1 = 0,80$ e $\Gamma_2 = 0,20$ (i) $\Gamma_1 = 0,20$ e $\Gamma_2 = 0,80$. Parâmetros fixos: $\Gamma_s = 0,30$, $P_1 = P_2 = 0,95$, $k_BT = 0,01$, $V_{ga} = V_{gb} = 0$, $\mathcal{K} = \mathcal{U} = 0$. Todos os parâmetros estão expressos em unidades do gap supercondutor.

na figura 5.6a, a ARMR para $\Gamma_1 = \Gamma_2$ é positiva para todos os valores dos potenciais aplicados. Para $V_2 \neq 0$ existem dois picos localizados em $V_1 \approx \pm 0, 22$, os quais correspondem ao valores de potencial onde I_{AP} é aproximadamente zero. Nas figuras 5.6b e 5.6c são mostradas as curvas de ARMR para os casos onde $\Gamma_1 > \Gamma_2$ e $\Gamma_1 < \Gamma_2$, respectivamente. Apesar da grande diferença de valores entre as correntes I_{AP} e I_P estas curvas mostram regiões com valores negativos da magnetoresistência. Nestas regiões a corrente I_{AP} é igual a zero e a corrente I_P é diferente de zero devido ao deslocamento pelo potencial V_2 . Na figura 5.6e, a corrente I_P apresenta grandes amplitudes mas um pequeno deslocamento ao longo do eixo vertical para $V_2 \neq 0$. Como resultado, as curvas correspondentes para ARMR apresentam uma forma similar a um degrau. No caso em que $\Gamma_2 > \Gamma_1$ a corrente I_P mostrada na figura 5.6f apresenta pequenas amplitudes mas grandes deslocamentos ao longo do eixo vertical resultando novamente em uma ARMR com a forma de um degrau. Estes resultados mostram que para determinados valores das constantes de acoplamento, é possível obter uma magnetoresistência que muda de valores positivos para negativos com a mudança do potencial aplicado. Em outras palavras, o sinal da ARMR pode ser controlado pela variação de um parâmetro externo.

As curvas para a corrente I_{AP} mostradas nas figuras 5.6g, 5.6h e 5.6i apresentam um aspecto que pode útil em aplicações práticas. O deslocamento ao longo do eixo vertical para $V_2 \neq 0$ estão relacionados com a aplicação do potencial em vez das constantes de acoplamento. O alto valor da polarização reduz a contribuição da reflexão de Andreev direta e a corrente I_{AP} é dominada pelo processo de reflexão de Andreev cruzada. Para esclarecer este ponto, é interessante reconsiderar a expressão (3.3.14) para o caso de temperatura nula de modo que as funções de Fermi se tornam funções de Heaviside. Negligenciando a contribuição da reflexão de Andreev direta segue que,

$$I_{AP}(V_1, V_2) = \int_{-V_2}^{+V_1} [A_{12}(\omega) + A_{21}(-\omega)] \, d\omega$$

o que implica que a corrente tende a zero quando $V_1 \rightarrow -V_2$. Esta condição determina o valor de V_1 onde $I_{AP} = 0$ e, com isso, os deslocamentos verticais com a variação de V_2 . O fato da corrente apresentar valor nulo para determinados valores do potencial pode ser interessante do ponto de vista de aplicações práticas. Além disso, quando a polarização dos eletrodos é igual à unidade, a corrente em cada eletrodo individual é de spin puro.

Para ilustrar este ponto, na figura 5.7 são apresentadas duas curvas para a corrente elétrica I_1 no eletrodo F_1 para $V_2 = 0, 30$ e $V_2 = -0, 30$ com $P_1 = P_2 = 1$. Desde que os ferromagentos estão na configuração antiparalela a corrente $I_{1,AP}$ é constituída somente por elétrons de spin up. Quando $|V_1| > 0, 40$ (fora da região sombreada) o sistema funciona como uma chave: se V_2 muda para $\pm 0, 30$ é possível comutar a corrente de zero para um valor máximo. Ou seja, é possível controlar a corrente no eletrodo F_1 mudando-se o potencial no outro eletrodo F_2 . Desta forma, este dispositivo pode ser interessante para aplicações em nanoeletrônica desde que se trata de um comportamento semelhante a de um transistor.

Na figura 5.8 são apresentadas algumas curvas de ARMR em função de θ para diferentes valores


Figura 5.7: Corrente I_1 em função do potencial V_1 para dois valores diferentes valores de V_2 . Para valores do potencial na região branca o sistema comporta-se como um transistor controlado por V_2 . Parâmetros fixos: $\Gamma_1 = 0, 20, \Gamma_2 = 0, 80, \Gamma_s = 0, 30, P_1 = P_2 = 1, 0, k_B T = 0, 01, V_{ga} = V_{gb} = 0, \mathcal{K} = \mathcal{U} = 0$. Todos os parâmetros estão expressos em unidades do gap supercondutor.

da polarização e do potencial aplicado nos pontos quânticos. Nestas curvas a polarização e o potencial aplicado são iguais para ambos os eletrodos, i.e., $V_1 = V_2 = V$ e $P_1 = P_2 = P$. Para V = 0,02 as curvas ARMR estão confinadas em valores negativos e à medida que o valor do potencial aumenta a magnetoresistência sofre uma transição para valores positivos. Esta transição ocorre para 0, 25 < V < 0, 30 conforme pode ser observado pelas figuras 5.8d e 5.8e para V = 0, 25 e V = 0, 30, respectivamente. A corrente I_{AP} aumenta à medida que $\theta \to \pi$ desde que cada eletrodo contribui com um elétron de cada spin. Assim, as curvas de ARMR são levadas para valores positivos com o aumento de θ . Este efeito torna-se mais pronunciado para valores mais altos do potencial aplicado desde que as corrente I_P acentuando a diferença entre I_{AP} e I_P . Os valores negativos de ARMR observados para valores de $V \approx 0$ (figuras 5.8a e 5.8b) podem ser entendidos considerando os resultados em zero-bias. Neste caso, a corrente I_{AP} para valores baixos do potencial aplicado.



Figura 5.8: ARMR em função do ângulo θ para diferentes valores da polarização P. Os potenciais aplicados nos ferromagnetos são mantidos iguais e constantes $V = V_1 = V_2$. (a) V = 0,02. (b) V = 0,10. (c) V = 0,20. (d) V = 0,25. (e) V = 0,30. (f) V = 0,90. Parâmetros fixos: $\Gamma_1 = 0,50, \Gamma_2 = 0,02, \Gamma_s = 1,0,$ $P_1 = P_2 = 0,95, k_BT = 0,01, V_{ga} = V_{gb} = 0, \mathcal{K} = \mathcal{U} = 0$. Todos os parâmetros estão expressos em unidades do gap supercondutor.

5.2 Resultados para o caso interagente

Na figura 5.9 são apresentadas algumas curvas da corrente em função do potencial e as correspondentes curvas da condutância diferencial. Nestas curvas é variada a interação intra-ponto quântico \mathcal{U} considerando-se nula a interação inter-pontos quânticos. Nestas curvas $V_2 = 0,36$ de modo que I = 0 para $V_1 = -0,36$. As curvas apresentam uma série de platôs devido ao caráter discreto da LDOS dos pontos quânticos. À medida que a interação \mathcal{U} é aumentada, o máximo da corrente é reduzido de 0,92 quando $\mathcal{U} = 0$ para 0,30 quando $\mathcal{U} = 0,90$. Assim como o sistema $F - QD_a - QD_b - S$ considerado no capítulo 4, nota-se que a condutância diferencial apresenta valores negativos para $V_1 \approx 0,45$ para $\mathcal{U} > 0,20$. É importante notar que para todas as curvas da figura 5.9 a polarização de ambos os ferromagnetos é igual a unidade. Desta forma, a corrente elétrica é dada somente pelo processo de reflexão de Andreev cruzada. Com isso, cada ferromagneto contribui com um elétron de cada spin e desta forma o fato da polarização ser igual à unidade não



reduz o número de elétrons que participam do processo de condução e com isso o sistema continua

Figura 5.9: Corrente e condutância diferencial em função do potencial aplicado para diferentes valores da interação intra pontos quânticos \mathcal{U} . Parâmetros fixos: $\Gamma_1 = 0, 10, \Gamma_2 = 0, 10, \Gamma_s = 1, 0, P_1 = P_2 = 1, 0, k_BT = 0, 01, V_{ga} = V_{gb} = 0, V_2 = 0, 36, \mathcal{K} = 0$. Todos os parâmetros estão expressos em unidades do gap supercondutor.

a ser sensível a redução da LDOS dos pontos quânticos. Isto é característico do fato dos ferromagnetos atuarem como um único ferromagneto cuja polarização efetiva é determinada pela orientação relativa das magnetizações.

Na figura 5.10 são apresentadas as curvas da LDOS para diferentes valores da interação \mathcal{U} . Para $\mathcal{U} = 0$ nota-se que as curvas para LDOS-A e LDOS-B apresentam quatro picos localizados simetricamente em relação a origem. A formação destas ressonâncias tem a mesma origem discutida no capítulo 3 para o sistema $F - QD_a - QD_b - S$. À medida que interação aumenta de $\mathcal{U} = 0$ para $\mathcal{U} = 0,90$, alguns picos são suprimidos e outros são reforçados. No caso da LDOS-A (figura 5.10a) os picos suprimidos estão localizados em $\omega = -0,47$ e $\omega = -0,13$ enquanto que os picos correspondentes da região positiva são reforçados. No caso da LDOS-B todos os picos são suprimidos conforme pode ser observado na figura 5.10b. Em particular, o pico situado em $\omega = +0,12$ é fortemente reduzido desde que este já apresenta baixa intensidade em $\mathcal{U} = 0$ devido ao acoplamento com o supercondutor. Estas assimetrias resultam na redução da corrente elétrica com o aumento de \mathcal{U} .

Devido à presença da interação, as curvas da LDOS e da transmitância do sistema dependem do potencial aplicado através da média da ocupação nos pontos quânticos. Os resultados mostrados na figura 5.10 correspondem a $V_1 = 0, 51$. Para justificar os valores negativos da condutância diferencial para $V_1 > 0,45$, na figura 5.11 são mostradas as curvas da LDOS para $\mathcal{U} = 0,90$ para diferentes valores do potencial V_1 . Nota-se que com o aumento do potencial de $V_1 = 0,40$ a $V_1 = 0,60$ ocorre uma redução adicional dos picos da LDOS. Como resultado, a condutância diferencial apresenta valores negativos neste intervalo de energia.



Figura 5.10: Densidade local de estados para diferentes valores da interação intra pontos quânticos para $V_1 = 0,51$. (a) LDOS-A. (b) LDOS-B. Parâmetros fixos: $\Gamma_1 = 0,10$, $\Gamma_2 = 0,10$, $\Gamma_s = 1,0$, $P_1 = P_2 = 1,0$, $k_BT = 0,01$, $V_{ga} = V_{gb} = 0$, $V_2 = 0,36$, $\mathcal{K} = 0$. Todos os parâmetros estão expressos em unidades do gap supercondutor.



Figura 5.11: Densidade local de estados para diferentes valores do potencial V_1 para $\mathcal{U} = 0,90$. (a) LDOS-A. (b) LDOS-B. Parâmetros fixos: $\Gamma_1 = 0,10$, $\Gamma_2 = 0,10$, $\Gamma_s = 1,0$, $P_1 = P_2 = 1,0$, $k_BT = 0,01$, $V_{ga} = V_{gb} = 0$, $V_2 = 0,36$, $\mathcal{K} = 0$. Todos os parâmetros estão expressos em unidades do gap supercondutor.

A LDOS mostrada nas figuras 5.10 e 5.11 justificam a redução da corrente elétrica e o surgi-

mento dos valores negativos da condutância diferencial. No entanto, uma característica peculiar da interação \mathcal{U} é a quebra da degerescência de spin nos pontos quânticos. Este efeito pode ser percebido nas curvas da LDOS para $\mathcal{U} > 0, 40$, na figura 5.10, e nas curvas da figura 5.11, para $V_1 > 0, 48$. Os picos dividem-se em dois e a separação entre eles aumenta com o aumento de \mathcal{U} ou do potencial para o caso de \mathcal{U} fixo em 0,90. Este efeito já foi discutido no capítulo 4 para o sistema com apenas um ferromagneto e observou-se naquele caso que a divisão dos picos da LDOS se refletia no transporte do sistema desde que a condutância diferencial apresentava um padrão de oito picos (ver figura 4.16). No entanto, no caso presente, a condutância diferencial não é afetada pela divisão dos picos conforme pode ser verificado pela figura 5.9b. Para entender este comportamento, na figura 5.12a são mostradas as transmitâncias $T_{AR(12)}$ e $T_{AR(21)}$ para $\mathcal{U} = 0,90$. Nota-se que as curvas individualmente não são simétricas em relação a origem o que é diferente do caso de apenas um ferromagneto. No entanto, as duas curvas combinadas apresentam um caráter simétrico como pode ser observado pela localização dos picos no espectro. O pico 1 de $T_{AR(12)}$ e o pico 1' de $T_{AR(21)}$ estão localizados em $\omega = +0, 10$ e $\omega = -0, 10$, respectivamente. A mesma simetria pode ser observada entre os picos 2 e 2', 3 e 3' e entre 4 e 4'. Este resultado mostra que os ferromagnetos atuam em conjunto de modo que a quebra da degenerescência de spin não tem efeito sobre a transmitância devido a cada eletrodo injetar um tipo de spin separadamente. Isto pode ser melhor observado na



Figura 5.12: Curvas de transmitância para o caso $\mathcal{U} = 0,90$. São mostradas duas curvas separadas em spin up e down devido a cada eletrodo conduzir um tipo de spin para o caso em que a polarização é igual à unidade. Parâmetros fixos: $\Gamma_1 = 0,10$, $\Gamma_2 = 0,10$, $\Gamma_s = 1,0$, $P_1 = P_2 = 1,0$, $k_BT = 0,01$, $V_{ga} = V_{gb} = 0$, $V_2 = 0,36$, $\mathcal{K} = 0$. Todos os parâmetros estão expressos em unidades do gap supercondutor.

figura 5.12b onde são mostradas três curvas de $T_{AR(12)}$ para diferentes valores do potencial V_1 . À medida que V_1 aumenta a curva como um todo é deslocada para a esquerda e a separação entre os picos aumenta sem haver um divisão dos mesmos tal como ocorre com a LDOS.

Conclusões

Neste trabalho foram estudadas as propriedades de transporte dos sistemas $F - QD_a - QD_b - S$ e $(F_1, F_2) - QD_a - QD_b - S$ usando-se o método de Keldysh para funções de Green de não-equilíbrio. A partir do formalismo discutido nos capítulos 1 e 2 foi possível obter expressões para a corrente elétrica, densidade local de estados, transmitância e ocupação média nos pontos quânticos.

6.1 O sistema $F - QD_a - QD_b - S$

A aproximação de campo médio realizada sobre o termo de interação permitiu obter equações fechadas para as auto-energias que descrevem as interações e o acoplamento dos pontos quânticos com os eletrodos. Com isso verificou-se que os sistemas estudados podem ser considerados como constituídos por apenas um ponto quântico conectado a um eletrodo ferromagnético e a um eletrodo efetivo composto pelo segundo ponto quântico combinado com o supercondutor.

A estrutura observada nas auto-energias descrita no parágrafo anterior se manifestou nos resultados de zero-bias onde se analisou a condutância do sistema em função da polarização do ferromagneto. O sistema é descrito por uma constante r que é dada pela razão do acoplamento com o ferromagneto (Γ_L) que está situado à direita do ponto quântico a, dado por uma constante efetiva $\Gamma_R = 4t_{ab}^2/\Gamma_s$. Estes resultados mostraram que o sistema é análogo a uma junção F/S onde existe uma condição de "matching" onde a reflexão de Andreev é máxima. Na condutância do sistema observou-se uma condição análoga em termos das constantes de acoplamento ($\Gamma_{1\uparrow}\Gamma_{1\downarrow} = \Gamma_s^2$) onde a reflexão de Andreev é máxima.

Nos resultados para o caso em que potenciais finitos são aplicados ficou claro que a corrente é fortemente dependente da LDOS dos pontos quânticos. Isso pode ser verificado pela estrutura de platôs da corrente elétrica decorrente da estrutura de picos da LDOS dos pontos quânticos. Esta estrutura de picos, por sua vez, é decorrente da hibridização dos níveis discretos dos pontos quânticos com os estados dos eletrodos. Devido ao caráter discreto dos níveis de Andreev do supercondutor, a LDOS do ponto quântico *b* apresenta uma assimetria entre os picos centrais e os externos. No entanto, fortalecendo o acoplamento com o ferromagneto, que apresenta um *continuum* de estados, é possível reduzir esta assimetria conforme pode ser verificado nas curvas da figura 4.5. Outro aspecto importante é a simetria da LDOS em relação a energia do sistema: aplicando potenciais de gate nos pontos quânticos verificou-se que é crucial que os picos da LDOS tenham a mesma forma para $\omega > 0$ e $\omega < 0$. Caso contrário a corrente é fortemente reduzida. Isso se deve ao eletrodo supercondutor requerer dois elétrons situados em energias simétricas em relação a $\mu_S = 0$ para formar o par de Cooper. Assim, no processo de reflexão de Andreev é tomado um elétron com energia ω e spin up e outro elétron com energia $-\omega$ e spin down e ambos se combinam em um par singleto situado na vizinhança da superfície de Fermi do supercondutor. Em conseqüência, é requerido um número igual de estados acima e abaixo de zero nos pontos quânticos para que a corrente seja efetivamente transportada neste sistema.

A estrutura de pontos quânticos duplos permitiu verificar os efeitos das interações intra e inter pontos quânticos sobre as propriedades de transporte do sistema. Notou-se que o efeito das interações resultou em uma assimetria da LDOS que dependia do potencial aplicado devido ao acoplamento das equações pela média das ocupações nos pontos quânticos (equações (3.3.16) a (3.3.19) do capítulo 3). A competição entre as correlações eletrônicas, produzindo as assimetrias nas LDOS do pontos quânticos e a supercondutividade, requerendo que a LDOS seja simétrica, resultou no surgimento de regiões de condutância diferencial negativa (CDN) no sistema. Este efeito já é conhecido na literatura em outros sistemas e seu surgimento é atribuído a outros mecanismos diferentes do considerado neste trabalho [99–105]. Desta forma, tanto o sistema estudado quanto a justificativa para o surgimento do efeito são resultados originais desta tese. Um outro aspecto importante foi a possibilidade de mudar a região onde a CDN ocorre através da aplicação de potenciais de gate. Isso reforçou a hipótese de que a LDOS é a responsável pelo surgimento da CDN neste sistema.

6.2 O sistema $(F_1, F_2) - QD_a - QD_b - S$

O sistema completo $(F_1, F_2) - QD_a - QD_b - S$ foi estudado no capítulo 5. Neste caso, devido a possibilidade de se definir uma magnetoresistência neste sistema, os esforços foram no sentido de investigar propriedades que sejam interessantes do pontos de vista de aplicação prática. Especificamente, nas áreas de spintrônica e eletrônica molecular, desde que os pontos quânticos também podem servir como modelos para moléculas diatômicas. A geometria de dois ferromagnetos conectados ao mesmo ponto quântico, fez com que estes se comportem com um ferromagneto efetivo cuja polarização é controlada via orientação da magnetização do ferromagneto 2. Conforme pode ser observado nos resultados em zero-bias, foi possível determinar uma condição de máximo equivalente ao caso de um eletrodo em termos do ângulo entre as magnetizações de F_1 e F_2 .

Conforme mostrado nas figuras 5.2, 5.4 e 5.6 a magnetoresistência do sistema pode assumir tanto valores positivos quanto negativos. Além disso, é possível modificar o sinal da mesma através de parâmetros externos como o potencial aplicado. Em zero bias, também foi apresentada uma possível maneira de medir a polarização de spin de um ferromagneto desconhecido em termos da condutância de um ferromagneto conhecido. Além destas propriedades também foi proposto na figura 5.7 um protótipo de transistor onde o fluxo de corrente elétrica em um eletrodo pode ser controlado variando-se o potencial no outro eletrodo. Estas propriedades são claramente relevantes do ponto de vista de aplicações.

Quando a interação intra-ponto quântico é ligada neste sistema, nota-se que surge novamente o efeito de CDN para determinados valores do potencial aplicado. Aqui este efeito pode ser verificado com as polarizações dos ferromagnetos fixas em 1. Além disso, o efeito da quebra da degenerescência de spin não afeta a forma das curvas $I \times V$ devido aos ferromagnetos transportarem um tipo de spin cada um.

6.3 Conclusão geral

No geral, os resultados apresentados mostram que a física de sistemas híbridos S/F é bastante rica quando combinada com correlações eletrônicas. A competição entre os requerimentos de simetria da correlação supercondutora e as assimetrias impostas pelas correlações eletrônicas determinam as propriedades de transporte destes sistemas. Além disso, a reflexão de Andreev permite que sejam exploradas as propriedades de spin dos elétrons proporcionando a possibilidade de construir dispositivos de spintrônica.

Possíveis extensões do estudo deste sistema compreendem uma análise mais aprofundada das correlações eletrônicas além da aproximação de campo médio; análise quantitativa do emaranhamento dos elétrons nos eletrodos ferromagnéticos através de ruído shot; mudança na geometria do acoplamento dos pontos quânticos com os eletrodos e também estender o efeito de proximidade para o ponto quântico acoplado ao supercondutor. Neste caso haveria a possibilidade de formação de um par de Cooper no segundo ponto quântico. Outra possibilidade seria a troca dos eletrodos ferromagnéticos por um segundo eletrodo supercondutor. Neste caso o sistema seria um modelo para uma junção Josephson molecular. Este tipo de nanoestrutura foi implementada por Makk *et al.* [106] e verificou-se que este sistema apresenta CDN. É possível que as idéias desenvolvidas neste trabalho de tese possam ser usadas para explicar os resultados experimentais verificados por Makk *et al.*.

Parte III

APÊNDICES

Demonstração das equações do capítulo 2

Neste apêndice é apresentada em detalhes a derivação da equação para a função de Green ordenada no contorno na versão de interação que permite que seja desenvolvida uma teoria perturbativa como no caso de equilíbrio.

A.1 Demonstração da equação (2.2.10)

A.1.1 Representação de Interação

Neste apêndice as partes interagente e perturbativa do Hamiltoniano serão tratadas simultâneamente. Desta forma, segue que,

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_i + \hat{H}'(t)$$

Com o Hamiltoniano acima pode-se definir um operador de evolução temporal entre dois tempos arbitrários da seguinte forma,

$$\hat{S}(t,t') = e^{i\hat{H}_0(t-t_0)}\hat{U}(t,t')e^{-i\hat{H}_0(t'-t_0)}$$
(A.1.1)

onde $\hat{U}(t, t') = e^{-i\hat{H}(t-t')}$ é o operador de evolução temporal. Diferenciando (A.1.1) em relação ao tempo t, pode-se escrever:

$$\begin{split} i\partial_t \hat{S}(t,t') &= -\hat{H}_0 e^{i\hat{H}_0(t-t_0)} \hat{U}(t,t') e^{-i\hat{H}_0(t'-t_0)} + e^{i\hat{H}_0(t-t_0)} \hat{H} \hat{U}(t,t') e^{-i\hat{H}_0(t'-t_0)} \\ i\partial_t \hat{S}(t,t') &= e^{i\hat{H}_0(t-t_0)} [-\hat{H}_0 + \hat{H}] \hat{U}(t,t') e^{-i\hat{H}_0(t'-t_0)} \\ i\partial_t \hat{S}(t,t') &= e^{i\hat{H}_0(t-t_0)} [\hat{H}_i + \hat{H}'(t)] \hat{U}(t,t') e^{-i\hat{H}_0(t'-t_0)} \end{split}$$

o que pode ser reescrito na seguinte forma,

$$\begin{split} i\partial_t \hat{S}(t,t') &= e^{i\hat{H}_0(t-t_0)} \hat{H}_i e^{-i\hat{H}_0(t-t_0)} e^{i\hat{H}_0(t-t_0)} \hat{U}(t,t') e^{-i\hat{H}_0(t'-t_0)} + \\ &\quad + e^{i\hat{H}_0(t-t_0)} \hat{H}'(t) e^{-i\hat{H}_0(t-t_0)} e^{i\hat{H}_0(t-t_0)} \hat{U}(t,t') e^{-i\hat{H}_0(t'-t_0)} \end{split}$$

ou ainda,

$$i\partial_t \hat{S}(t,t') = \left(\hat{H}^i_{H_0} + \hat{H}'_{H_0}(t)\right) \hat{S}(t,t').$$

A equação acima pode ser integrada de modo que,

$$\hat{S}(t,t') = 1 - i \int_{t'}^{t} dt_1 \,\hat{\mathcal{H}}(t_1) \hat{S}(t_1,t') \tag{A.1.2}$$

onde, $\hat{A}_{H_0} = e^{i\hat{H}_0(t-t_0)}\hat{A}e^{-i\hat{H}_0(t'-t_0)}$. Além disso foi definido,

$$\hat{\mathcal{H}}(t) = \hat{H}_{H_0}^i(t) + \hat{H}_{H_0}'(t).$$
(A.1.3)

Iterando a equação (A.1.10) até segunda ordem, segue que:

$$\hat{S}(t,t') = 1 - i \int_{t'}^{t} dt_1 \,\hat{\mathcal{H}}(t_1) + (-i)^2 \int_{t'}^{t} dt_1 \int_{t'}^{t_1} dt_2 \hat{\mathcal{H}}(t_1) \hat{\mathcal{H}}(t_2) + \dots \\ + (-i)^n \int_{t'}^{t} dt_1 \int_{t'}^{t_1} dt_2 \, \dots \, \int_{t'}^{t_{n-1}} dt_n \hat{\mathcal{H}}(t_1) \hat{\mathcal{H}}(t_1) \, \dots \, \hat{\mathcal{H}}(t_n) = \\ = \sum_{n=0}^{\infty} (-i)^n \int_{t'}^{t} dt_1 \int_{t'}^{t_1} dt_2 \, \dots \, \int_{t'}^{t_{n-1}} dt_n \hat{\mathcal{H}}(t_1) \, \dots \, \hat{\mathcal{H}}(t_n). \quad (A.1.4)$$

A equação (A.1.3) tem como característica o fato dos operadores com os tempos posteriores ficarem mais à esquerda. Neste sentido, é conveniente introduzir o operador de evolução temporal denotado pelo símbolo \mathcal{T} ,

$$\mathcal{T}[\hat{A}(t_1)\hat{B}(t_2)] = \vartheta(t_1 - t_2)\hat{A}(t_1)\hat{B}(t_2) + \vartheta(t_2 - t_1)\hat{B}(t_2)\hat{A}(t_1)$$

Com o objetivo de simplificar a equação (A.1.4), será considerada a seguinte integral iterada,

onde a região de integração foi alterada na segunda integral . Desde que os índices são mudos, pode-se ainda fazer a troca $t_1 \leftrightarrows t_2$, assim, segue que,

$$\int_{t'}^{t} dt_1 \int_{t'}^{t_1} dt_2 \ \hat{A}(t_1) \hat{B}(t_2) = \frac{1}{2} \int_{t'}^{t} dt_1 \int_{t'}^{t_1} dt_2 \ \hat{A}(t_1) \hat{B}(t_2) + \frac{1}{2} \int_{t'}^{t} dt_1 \int_{t'}^{t_1} dt_2 \ \hat{A}(t_1) \hat{B}(t_2) = \frac{1}{2} \int_{t'}^{t} dt_1 \int_{t'}^{t_1} dt_1 \int_{t'}^{t_1} dt_2 \ \hat{A}(t_1) \hat{B}(t_2) + \frac{1}{2} \int_{t'}^{t} dt_1 \int_{t_1}^{t} dt_2 \ \hat{A}(t_2) \hat{B}(t_1) = \frac{1}{2} \int_{t'}^{t} dt_1 \int_{t'}^{t} dt_1 \int_{t'}^{t} dt_2 [\vartheta(t_1 - t_2) \hat{A}(t_1) \hat{B}(t_2) + \vartheta(t_2 - t_1) \ \hat{A}(t_2) \hat{B}(t_1)]$$

portanto,

$$\int_{t'}^{t} dt_1 \int_{t'}^{t_1} dt_2 \ \hat{A}(t_1) \hat{B}(t_2) = \frac{1}{2} \int_{t'}^{t} dt_1 \int_{t'}^{t} dt_2 \ \mathcal{T}[\hat{A}(t_1) \hat{B}(t_2)]$$
(A.1.5)

e, por indução,

$$\int_{t'}^{t} dt_1 \int_{t'}^{t_1} \dots \int_{t'}^{t_{n-1}} dt_n \ \hat{A}(t_1) \hat{B}(t_2) \dots \hat{Z}(t_n) = \frac{1}{n!} \int_{t'}^{t} dt_1 \int_{t'}^{t} dt_2 \dots \int_{t'}^{t} dt_n \ \mathcal{T}[\hat{A}(t_1) \hat{B}(t_2) \dots \hat{Z}(t_n)]$$
(A.1.6)

com isso pode-se escrever (A.1.7) da seguinte forma,

$$\hat{S}(t,t') = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-i)^n}{n!} \int_{t'}^t dt_1 \int_{t'}^t dt_2 \dots \int_{t'}^t dt_n \mathcal{T}[\hat{\mathcal{H}}(t_1) \ \dots \ \hat{\mathcal{H}}(t_n)] = \mathcal{T}\left[\exp\left(-i \int_{t'}^t d\tau \ \hat{\mathcal{H}}(\tau)\right)\right]$$
(A.1.7)

Finalmente considerando a definição (A.1.3), tem-se finalmente,

$$\hat{S}(t,t') = \mathcal{T}[\exp\left\{-i\int_{t'}^{t} d\tau [\hat{H}_{H_0}^i(\tau) + \hat{H}_{H_0}'(\tau)\right\}].$$
(A.1.8)

É importante lembrar que a relação entre um operador \mathcal{O}_H na versão de Heisenberg e na versão de interação é dada por,

$$\mathcal{O}_H = S(t_0, t)\mathcal{O}_{H_0}S(t, t_0) \tag{A.1.9}$$

A.1.2 Função de Green ordenada no contorno na versão de interação

Retomando a equação (2.2.1), tem-se que,

$$G(\mathbf{r},t;\mathbf{r}',t') = -i\langle \mathcal{T}\{\hat{\psi}_H(\mathbf{r},t)\hat{\psi}_H^{\dagger}(\mathbf{r}',t')\}\rangle$$

onde os " $\langle \rangle$ " indicam uma média térmica, ou seja,

$$G(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') = -i \frac{\operatorname{Tr}[\hat{\varrho}(\hat{h})\mathcal{T}\{\hat{\psi}_{H}(\mathbf{r}, t)\hat{\psi}_{H}^{\dagger}(\mathbf{r}', t')\}]}{\operatorname{Tr}[\hat{\varrho}(\hat{h})]}$$

onde $\hat{h} = \hat{H}_0 + \hat{H}_i$. Considerando o ordenamento temporal dos operadores após trocar para a versão de interação, tem-se que,

$$\mathcal{T}\{\hat{\psi}_{H}(\mathbf{r},t)\hat{\psi}_{H}^{\dagger}(\mathbf{r}',t')\} = \vartheta(t-t')[\hat{S}(t_{0},t)\hat{\psi}_{H_{0}}(\mathbf{r},t)\hat{S}(t,t_{0})\hat{S}(t_{0},t')\hat{\psi}_{H_{0}}^{\dagger}(\mathbf{r}',t')\hat{S}(t',t_{0})] - \vartheta(t'-t)[\hat{S}(t_{0},t')\hat{\psi}_{H_{0}}^{\dagger}(\mathbf{r},t')\hat{S}(t',t_{0})\hat{S}(t_{0},t)\hat{\psi}_{H_{0}}(\mathbf{r}',t)\hat{S}(t,t_{0})]$$

usando a propriedade de grupo do operador $\hat{S}(t,t_1) = \hat{S}(t,t_2)\hat{S}(t_2,t_1)$, é possível escrever,

$$\mathcal{T}\{\hat{\psi}_{H}(\mathbf{r},t)\hat{\psi}_{H}^{\dagger}(\mathbf{r}',t')\} = \vartheta(t-t')[\hat{S}(t_{0},t)\hat{\psi}_{H_{0}}(\mathbf{r},t)\hat{S}(t,t')\hat{\psi}_{H_{0}}^{\dagger}(\mathbf{r}',t')\hat{S}(t',t_{0})] - \\ - \vartheta(t'-t)[\hat{S}(t_{0},t')\hat{\psi}_{H_{0}}^{\dagger}(\mathbf{r},t')\hat{S}(t',t)\hat{\psi}_{H_{0}}(\mathbf{r}',t)\hat{S}(t,t_{0})],$$

exceto pelo primeiro operador $\hat{S}(t, t_0)$ em cada termo, o restante está ordenado temporalmente, assim, definindo $t_m = \max(t, t')$, a seguinte relação reproduz os dois termos acima:

$$\mathcal{T}\{\hat{\psi}_{H}(\mathbf{r},t)\hat{\psi}_{H}^{\dagger}(\mathbf{r}',t')\} = \hat{S}(t_{0},t_{m})\mathcal{T}\{\exp\left\{-i\int_{t_{0}}^{t_{m}}d\tau[\hat{H}_{H_{0}}^{i}(\tau)+\hat{H}_{H_{0}}^{i}(\tau)]\right\}\hat{\psi}_{H_{0}}(\mathbf{r},t)\hat{\psi}_{H_{0}}^{\dagger}(\mathbf{r}',t')\}.$$

$$\mathcal{T}\{\hat{\psi}_{H}(\mathbf{r},t)\hat{\psi}_{H}^{\dagger}(\mathbf{r}',t')\} = \\ = \tilde{\mathcal{T}}\{\exp\left\{i\int_{t_{0}}^{t_{m}}d\tau[\hat{H}_{H_{0}}^{i}(\tau)+\hat{H}_{H_{0}}'(\tau)]\right\}\mathcal{T}\{\exp\left\{-i\int_{t_{0}}^{t_{m}}d\tau[\hat{H}_{H_{0}}^{i}(\tau)+\hat{H}_{H_{0}}'(\tau)]\right\}\hat{\psi}_{H_{0}}(\mathbf{r},t)\hat{\psi}_{H_{0}}^{\dagger}(\mathbf{r}',t')\}.$$

$$\mathcal{T}\{\hat{\psi}_{H}(\mathbf{r},t)\hat{\psi}_{H}^{\dagger}(\mathbf{r}',t')\} = \\ = \tilde{\mathcal{T}}\{\exp\left\{-i\int_{t_{m}}^{t_{0}}d\tau[\hat{H}_{H_{0}}^{i}(\tau) + \hat{H}_{H_{0}}'(\tau)]\right\}\mathcal{T}\{\exp\left\{-i\int_{t_{0}}^{t_{m}}d\tau[\hat{H}_{H_{0}}^{i}(\tau) + \hat{H}_{H_{0}}'(\tau)]\right\}\hat{\psi}_{H_{0}}(\mathbf{r},t)\hat{\psi}_{H_{0}}^{\dagger}(\mathbf{r}',t')\} \\ = \frac{\tilde{\mathcal{T}}\{\exp\left\{-i\int_{t_{m}}^{t_{0}}d\tau[\hat{H}_{H_{0}}^{i}(\tau) + \hat{H}_{H_{0}}'(\tau)]\right\}\mathcal{T}\{\exp\left\{-i\int_{t_{0}}^{t_{m}}d\tau[\hat{H}_{H_{0}}^{i}(\tau) + \hat{H}_{H_{0}}'(\tau)]\right\}\hat{\psi}_{H_{0}}(\mathbf{r},t)\hat{\psi}_{H_{0}}^{\dagger}(\mathbf{r}',t')\} \\ = \frac{\tilde{\mathcal{T}}\{\exp\left\{-i\int_{t_{m}}^{t_{0}}d\tau[\hat{H}_{H_{0}}^{i}(\tau) + \hat{H}_{H_{0}}'(\tau)]\right\}\mathcal{T}\{\exp\left\{-i\int_{t_{0}}^{t_{m}}d\tau[\hat{H}_{H_{0}}^{i}(\tau) + \hat{H}_{H_{0}}'(\tau)]\right\}\hat{\psi}_{H_{0}}(\mathbf{r},t)\hat{\psi}_{H_{0}}^{\dagger}(\mathbf{r}',t')\} \\ = \frac{\tilde{\mathcal{T}}\{\exp\left\{-i\int_{t_{m}}^{t_{0}}d\tau[\hat{H}_{H_{0}}^{i}(\tau) + \hat{H}_{H_{0}}'(\tau)]\right\}\mathcal{T}\{\exp\left\{-i\int_{t_{0}}^{t_{m}}d\tau[\hat{H}_{H_{0}}^{i}(\tau) + \hat{H}_{H_{0}}'(\tau)]\right\}\hat{\psi}_{H_{0}}(\mathbf{r},t)\hat{\psi}_{H_{0}}^{\dagger}(\mathbf{r}',t')\}$$

definindo o contorno $C_1 \equiv [t_0, t_m]$ e $C_2 \equiv [t_m, t_0]$, pode-se reescrever ainda¹,

$$\mathcal{T}\{\hat{\psi}_{H}(\mathbf{r},t)\hat{\psi}_{H}^{\dagger}(\mathbf{r}',t')\} = \\ = \tilde{\mathcal{T}}\{\exp\left\{-i\int_{C_{2}}d\tau[\hat{H}_{H_{0}}^{i}(\tau) + \hat{H}_{H_{0}}'(\tau)]\right\}\mathcal{T}\{\exp\left\{-i\int_{C_{1}}d\tau[\hat{H}_{H_{0}}^{i}(\tau) + \hat{H}_{H_{0}}'(\tau)]\right\}\hat{\psi}_{H_{0}}(\mathbf{r},t)\hat{\psi}_{H_{0}}^{\dagger}(\mathbf{r}',t')\}.$$

Usando o operador de ordenamento temporal, é possível simplificar ainda mais a equação acima. Considerando que os tempos t e t' estão definidos em um contorno $C = C_1 \cup C_2$ saindo e voltando a t_0 , pode-se escrever ainda²,

$$\mathcal{T}\{\hat{\psi}_{H}(\mathbf{r},t)\hat{\psi}_{H}^{\dagger}(\mathbf{r}',t')\} = \mathcal{T}_{c}\{\exp\left\{-i\left[\int_{C_{1}}+\int_{C_{2}}\right]d\tau[\hat{H}_{H_{0}}^{i}(\tau)+\hat{H}_{H_{0}}'(\tau)]\right\}\hat{\psi}_{H_{0}}(\mathbf{r},t)\hat{\psi}_{H_{0}}^{\dagger}(\mathbf{r}',t')\}$$

e definindo o operador \hat{S}_C como:

$$\hat{S}_{C} = \exp\left\{-i\int_{C} d\tau [\hat{H}_{H_{0}}^{i}(\tau) + \hat{H}_{H_{0}}^{\prime}(\tau)\right\},\tag{A.1.10}$$

$$T_C\left(e^{-i\int_C d\tau [\hat{H}_{H_0}^i(\tau) + \hat{H}_{H_0}^\prime(\tau)]}\right) = T_C\left(e^{-i\int_C d\tau \hat{H}_{H_0}^i(\tau)} e^{-i\int_C d\tau \hat{H}_{H_0}^\prime(\tau)}\right)$$

¹Note que o ramo C_2 é definido de maneira que os operadores são ordenados "anti-temporalmente".

 $^{^{2}}$ Sob o operador de ordenamento temporal, operadores podem ser comutados, deixando a álgebra de operadores idêntica a de números de modo que,

tem-se finalmente,

$$\mathcal{T}\{\hat{\psi}_{H}(\mathbf{r},t)\hat{\psi}_{H}^{\dagger}(\mathbf{r}',t')\} = \mathcal{T}_{c}\{\hat{S}_{C}\hat{\psi}_{H_{0}}(\mathbf{r},t)\hat{\psi}_{H_{0}}^{\dagger}(\mathbf{r}',t')\}.$$
(A.1.11)

Com (A.1.11) a função de Green toma a forma,

$$G(\mathbf{r},t;\mathbf{r}',t') = -i \frac{\text{Tr}[\hat{\varrho}(\hat{h})\mathcal{T}_c\{\hat{S}_C\hat{\psi}_{H_0}(\mathbf{r},t)\hat{\psi}_{H_0}^{\dagger}(\mathbf{r}',t')\}]}{\text{Tr}[\hat{\varrho}(\hat{h})]}$$

A matriz densidade contém o Hamiltoniano interagente e, desta forma, este também deve ser eliminado da relação acima. O operador $\hat{u}(t, t_0)$ pode ser escrito na seguinte forma,

$$\hat{u}(t,t_0) = e^{iH_0(t-t_0)}\hat{U}_h(t,t_0)$$
(A.1.12)

onde $\hat{U}_h(t, t_0) = e^{-i\hat{h}(t-t_0)}$ é o operador evolução temporal para estados na versão de Schrödinger. Fazendo $t = t_0 - i\beta$, em (A.1.12) tem-se que,

$$\hat{u}(t_0 - i\beta, t_0) = e^{i\hat{H}_0(t_0 - i\beta - t_0)}\hat{U}(t_0 - i\beta, t_0) = e^{\beta\hat{H}_0}e^{-\beta\hat{h}_0}$$

portanto,

$$e^{-\beta \hat{h}} = e^{-\beta \hat{H}_0} \hat{u}(t_0 - i\beta, t_0).$$
(A.1.13)

Através de um procedimento análogo ao adotado para obter o operador $\hat{S}(t, t')$ pode-se obter uma equação para o operador $\hat{u}(t, t_0)$ a qual é dada por,

$$\hat{u}(t,t_0) = \mathcal{T} \exp\left[-i \int_{t_0}^t d\tau \hat{H}_{H_0}^i(\tau)\right]$$
(A.1.14)

com isso escreve-se a equação final para a matriz densidade:

$$e^{-\beta \hat{H}} = e^{-\beta \hat{H}_0} \mathcal{T} e^{-i \int_{t_0}^{t_0 - i\beta} d\tau \hat{H}_{H_0}^i(\tau)}.$$
 (A.1.15)

Definindo um prolongamento C_u no contorno C de modo que os tempos sejam ordenados neste contorno, pode-se escrever (A.1.16) na seguinte forma,

$$e^{-\beta \hat{h}} = e^{-\beta \hat{H}_0} \mathcal{T}_{C_u} e^{-i \int_{C_u} d\tau \hat{H}^i_{H_0}(\tau)}$$
(A.1.16)

Substituindo (A.1.16) na função de Green segue que,

$$G(\mathbf{r},t;\mathbf{r}',t') = -i \frac{\text{Tr}[e^{-\beta \hat{H}_0} \mathcal{T}_{C_u} e^{-i \int_{C_u} d\tau \hat{H}_{H_0}^i(\tau)} \mathcal{T}_C \{\hat{S}_C \hat{\psi}_{H_0}(\mathbf{r},t) \hat{\psi}_{H_0}^\dagger(\mathbf{r}',t')\}]}{\text{Tr}[e^{-\beta \hat{H}_0} \mathcal{T}_{C_u} e^{-i \int_{C_u} d\tau \hat{H}_{H_0}^i(\tau)}]}$$

escrevendo \hat{S}_C explicit
amente:

$$G(\mathbf{r},t;\mathbf{r}',t') = -i \frac{\text{Tr}[e^{-\beta\hat{H}_0}\mathcal{T}_{C_u}e^{-i\int_{C_u}d\tau\hat{H}_{H_0}^i(\tau)}\mathcal{T}_C\{e^{-i\int_Cd\tau[\hat{H}_{H_0}^i(\tau)+\hat{H}_{H_0}^i(\tau)]}\hat{\psi}_{H_0}(\mathbf{r},t)\hat{\psi}_{H_0}^\dagger(\mathbf{r}',t')\}]}{\text{Tr}[e^{-\beta\hat{H}_0}\mathcal{T}_{C_u}e^{-i\int_{C_u}d\tau\hat{H}_{H_0}^i(\tau)}]}.$$

O termo imaginário correspondente ao contorno C_u pode ser adicionado ao contorno C definindo um novo contorno $C^* = C_u \cup C$, assim pode-se escrever,

$$G(\mathbf{r},t;\mathbf{r}',t') = -i \frac{\text{Tr}[\mathcal{T}_{C^*}\{e^{-\beta\hat{H}_0}e^{-i(\int_{C_u}+\int_C)d\tau\hat{H}_{H_0}^i(\tau)}e^{-i\int_C d\tau\hat{H}_{H_0}^i(\tau)}\hat{\psi}_{H_0}(\mathbf{r},t)\hat{\psi}_{H_0}^\dagger(\mathbf{r}',t')\}]}{\text{Tr}[e^{-\beta\hat{H}_0}\mathcal{T}_{C_u}e^{-i\int_{C_u}d\tau\hat{H}_{H_0}^i(\tau)}]}$$

$$G(\mathbf{r},t;\mathbf{r}',t') = -i \frac{\text{Tr}[\mathcal{T}_{C^*}\{e^{-\beta\hat{H}_0}e^{-i\int_{C^*}d\tau\hat{H}_{H_0}^i(\tau)}e^{-i\int_{C}d\tau\hat{H}'_{H_0}(\tau)}\hat{\psi}_{H_0}(\mathbf{r},t)\hat{\psi}_{H_0}^{\dagger}(\mathbf{r}',t')\}]}{\text{Tr}[e^{-\beta\hat{H}_0}\mathcal{T}_{C_u}e^{-i\int_{C_u}d\tau\hat{H}_{H_0}^i(\tau)}]}$$

e, desde que,

$$\mathcal{T}_C\{e^{-i\int_C d\tau [\hat{H}^i_{H_0}(\tau) + \hat{H}'_{H_0}(\tau)]} = 1$$

este termo pode ser substituído no denominador e fazendo as mesmas combinações realizadas no numerador, obtém-se que,

$$G(\mathbf{r},t;\mathbf{r}',t') = -i \frac{\text{Tr}[\mathcal{T}_{C^*}\{e^{-\beta\hat{H}_0}e^{-i\int_{C^*}d\tau\hat{H}_{H_0}^i(\tau)}e^{-i\int_{C}d\tau\hat{H}'_{H_0}(\tau)}\hat{\psi}_{H_0}(\mathbf{r},t)\hat{\psi}_{H_0}^{\dagger}(\mathbf{r}',t')\}]}{\text{Tr}[e^{-\beta\hat{H}_0}\mathcal{T}_{C^*}\{e^{-\beta\hat{H}_0}e^{-i\int_{C^*}d\tau\hat{H}_{H_0}^i(\tau)}e^{-i\int_{C}d\tau\hat{H}'_{H_0}(\tau)}]}$$

e definindo,

$$S'_{C} = \exp\left\{-i \int_{C} d\tau \hat{H}'_{H_{0}}(\tau)\right\}$$
$$S^{i}_{C^{*}} = \exp\left\{-i \int_{C^{*}} d\tau \hat{H}^{i}_{H_{0}}(\tau)\right\}$$

pode-se escrever a função de Green na forma mais compacta,

$$G(\mathbf{r},t;\mathbf{r}',t') = -i \frac{\text{Tr}[\mathcal{T}_{C^*}\{e^{-\beta \hat{H}_0} S_{C^*}^i S_C' \hat{\psi}_{H_0}(\mathbf{r},t) \hat{\psi}_{H_0}^{\dagger}(\mathbf{r}',t')\}]}{\text{Tr}[e^{-\beta \hat{H}_0} \mathcal{T}_{C^*}\{S_{C^*}^i S_C'\}]}$$

que é a equação para a função de Green ordenada no contorno dada por (2.2.10).

Cálculo das auto-energias e funções de Green dos eletrodos isolados

B.1 Função de Green e auto-energia do supercondutor

A função de Green retardada/avançada na notação de Nambu generalizada é dada por,

$$\mathbf{g}_{s}^{r/a}(t_{1},t_{2}) = \sum_{kq} \mathbf{g}_{s,kq}^{r/a}(t_{1},t_{2}) = \mp i\vartheta(\pm t_{1} \mp t_{2}) \sum_{kq} \langle [\widetilde{\mathbf{\Phi}}_{sk}(t_{1}) \otimes \widetilde{\mathbf{\Phi}}_{sq}^{\dagger}(t_{2}) + \widetilde{\mathbf{\Phi}}_{sq}^{\dagger}(t_{2}) \otimes \widetilde{\mathbf{\Phi}}_{sk}(t_{1})] \rangle$$

onde $\hat{\Phi}_{sk} = (\hat{s}_{k\uparrow}^{\dagger} \ \hat{s}_{k\downarrow} \ \hat{s}_{k\downarrow}^{\dagger} \ \hat{s}_{k\uparrow})^{\dagger}$. O símbolo "~" indica que os operadores estão expressos na versão de interação. Explicitamente, pode-se escrever,

$$\begin{aligned} \mathbf{g}_{s,kq}^{r/a}(t_{1},t_{2}) &= \mp i\vartheta(\pm t_{1} \mp t_{2}) \times \\ \times \begin{pmatrix} \langle \{\hat{s}_{k\uparrow}(t_{1}), \hat{s}_{q\uparrow}^{\dagger}(t_{2})\} \rangle & \langle \{\hat{s}_{k\uparrow}(t_{1}), \hat{s}_{q\downarrow}(t_{2})\} \rangle & \langle \{\hat{s}_{k\uparrow}(t_{1}), \hat{s}_{q\downarrow}^{\dagger}(t_{2})\} \rangle & \langle \{\hat{s}_{k\uparrow}(t_{1}), \hat{s}_{q\uparrow}^{\dagger}(t_{2})\} \rangle \\ \langle \{\hat{s}_{k\downarrow}^{\dagger}(t_{1}), \hat{s}_{q\uparrow}^{\dagger}(t_{2})\} \rangle & \langle \{\hat{s}_{k\downarrow}(t_{1}), \hat{s}_{q\downarrow}(t_{2})\} \rangle & \langle \{\hat{s}_{k\downarrow}(t_{1}), \hat{s}_{q\downarrow}^{\dagger}(t_{2})\} \rangle & \langle \{\hat{s}_{k\downarrow}(t_{1}), \hat{s}_{q\uparrow}^{\dagger}(t_{2})\} \rangle \\ \langle \{\hat{s}_{k\downarrow}(t_{1}), \hat{s}_{q\uparrow}^{\dagger}(t_{2})\} \rangle & \langle \{\hat{s}_{k\downarrow}(t_{1}), \hat{s}_{q\downarrow}(t_{2})\} \rangle & \langle \{\hat{s}_{k\downarrow}(t_{1}), \hat{s}_{q\uparrow}(t_{2})\} \rangle \\ \langle \{\hat{s}_{k\uparrow}^{\dagger}(t_{1}), \hat{s}_{q\uparrow}^{\dagger}(t_{2})\} \rangle & \langle \{\hat{s}_{k\uparrow}(t_{1}), \hat{s}_{q\downarrow}(t_{2})\} \rangle & \langle \{\hat{s}_{k\uparrow}(t_{1}), \hat{s}_{q\uparrow}(t_{2})\} \rangle \end{pmatrix} \end{pmatrix} \end{pmatrix} \end{aligned}$$

esta é a função de Green retardada/avançada. Considerando então que os operadores estão na versão de interação então a evolução temporal dos operadores é dada pelo Hamiltoniano BCS (eq. (3.1.4)):

$$\hat{H}_S = \sum_{k\sigma} (\epsilon_k - \mu_S) \hat{s}^{\dagger}_{k\sigma} \hat{s}_{k\sigma} + \sum_k \left(\Delta \hat{s}^{\dagger}_{k\uparrow} \hat{s}^{\dagger}_{-k\downarrow} + \Delta^* \hat{s}_{-k\downarrow} \hat{s}_{k\uparrow} \right).$$

Para determinar a evolução temporal é mais conveniente diagonalizar o Hamiltoniano \hat{H}_S . Para isso será aplicada a transformação de Bogoliubov [86]:

$$\hat{s}_{k\sigma} = \cos \alpha_k \hat{\gamma}_{k\sigma} + \operatorname{sgn}(\sigma) \operatorname{sen} \alpha_k \hat{\gamma}_{k\bar{\sigma}}^{\dagger} \tag{B.1.1}$$

a qual permite escrever o Hamiltoniano (3.1.4) da seguinte maneira:

$$\hat{H}_S = \sum_{k\sigma} E_k \hat{\gamma}^{\dagger}_{k\sigma} \hat{\gamma}_{k\sigma} + \text{const.}$$

onde,

$$E_k = \sqrt{\epsilon_k^2 + \Delta^2} - \mu_S.$$

e,

$$\cos \alpha_k = \sqrt{\frac{1}{2} \left(1 - \frac{\epsilon_k}{E_k} \right)}$$
$$\operatorname{sen} \alpha_k = \sqrt{\frac{1}{2} \left(1 + \frac{\epsilon_k}{E_k} \right)}$$

A evolução temporal dos operadores de campo γ e γ^\dagger é trivial desde que o Hamiltoniano é diagonal assim,

$$\gamma_{k\sigma}(t) = \gamma_{k0\sigma} e^{-iE_k(t-t_0)} \tag{B.1.2}$$

onde $\gamma_{0k\sigma}\equiv\gamma_{k\sigma}(t_0).$ Com isso, a equação (B.1.1) toma a forma,

$$\hat{s}_{k\sigma}(t) = \cos \alpha_k \hat{\gamma}_{0k\sigma} e^{-iE_k(t-t_0)} + \operatorname{sgn}(\sigma) \operatorname{sen} \alpha_k \hat{\gamma}^{\dagger}_{0k\bar{\sigma}} e^{iE_k(t-t_0)}$$
(B.1.3)

e tomando o adjunto desta equação tem-se ainda,

$$\hat{s}_{k\sigma}^{\dagger}(t) = \cos \alpha_k \hat{\gamma}_{0k\sigma}^{\dagger} e^{iE_k(t-t_0)} + \operatorname{sgn}(\sigma) \operatorname{sen} \alpha_k \hat{\gamma}_{0k\bar{\sigma}} e^{-iE_k(t-t_0)}$$
(B.1.4)

As relações (B.1.3) e (B.1.4) permitem determinar os anticomutadores que aparecem na função de Green retardada, assim tem-se que,

$$\{\hat{s}_{k\sigma}(t_1), \hat{s}_{q\mu}^{\dagger}(t_2)\} = \left\{ \left(\cos \alpha_k \hat{\gamma}_{0k\sigma} e^{-iE_k(t_1 - t_0)} + \operatorname{sgn}(\sigma) \sin \alpha_k \hat{\gamma}_{0k\bar{\sigma}}^{\dagger} e^{iE_k(t_1 - t_0)} \right) \\ , \left(\cos \alpha_q \hat{\gamma}_{0q\mu}^{\dagger} e^{iE_q(t_2 - t_0)} + \operatorname{sgn}(\mu) \sin \alpha_q \hat{\gamma}_{0q\bar{\mu}} e^{-iE_q(t_2 - t_0)} \right) \right\}$$

e como o anticomutador é distributivo e os operadores $\hat{\gamma}_{0k\sigma}$, $\hat{\gamma}^{\dagger}_{0k\sigma}$ preservam as relações de anticomutação para férmions, alguns termos são nulos restando-se apenas os seguintes,

$$\{\hat{s}_{k\sigma}(t_{1}), \hat{s}_{q\mu}^{\dagger}(t_{2})\} = \left\{\cos\alpha_{k}\hat{\gamma}_{0k\sigma}e^{-iE_{k}(t_{1}-t_{0})}, \cos\alpha_{q}\hat{\gamma}_{0q\mu}^{\dagger}e^{iE_{q}(t_{2}-t_{0})}\right\} + \left\{\operatorname{sgn}(\sigma)\operatorname{sen}\alpha_{k}\hat{\gamma}_{0k\bar{\sigma}}^{\dagger}e^{iE_{k}(t_{1}-t_{0})}, \operatorname{sgn}(\mu)\operatorname{sen}\alpha_{q}\hat{\gamma}_{0q\bar{\mu}}e^{-iE_{q}(t_{2}-t_{0})}\right\}$$

portanto, pode-se escrever,

$$\{\hat{s}_{k\sigma}(t_1), \hat{s}_{q\mu}^{\dagger}(t_2)\} = \delta_{\sigma\mu} \delta_{kq} \left(\cos^2 \alpha_k e^{-iE_k(t_1 - t_2)} + \sin^2 \alpha_k e^{iE_k(t_1 - t_2)} \right)$$
(B.1.5)

e tomando o adjunto, tem-se ainda uma segunda relação que será útil,

$$\{\hat{s}_{k\sigma}^{\dagger}(t_1), \hat{s}_{q\mu}(t_2)\} = \delta_{\sigma\mu}\delta_{kq} \left(\cos^2 \alpha_k e^{iE_k(t_1 - t_2)} + \sin^2 \alpha_k e^{-iE_k(t_1 - t_2)}\right).$$
(B.1.6)

Agora será considerada a anticomutação entre dois operadores de aniquilação que é nula quando os tempos dos operadores são iguais. No caso de tempos diferentes, tem-se que,

$$\{\hat{s}_{k\sigma}(t_1), \hat{s}_{q\mu}(t_2)\} = \left\{ \left(\cos \alpha_k \hat{\gamma}_{0k\sigma} e^{-iE_k(t_1 - t_0)} + \operatorname{sgn}(\sigma) \operatorname{sen} \alpha_k \hat{\gamma}_{0k\bar{\sigma}}^{\dagger} e^{iE_k(t_1 - t_0)} \right) \\ , \left(\cos \alpha_q \hat{\gamma}_{0q\mu} e^{-iE_q(t_2 - t_0)} + \operatorname{sgn}(\mu) \operatorname{sen} \alpha_q \hat{\gamma}_{0q\bar{\mu}}^{\dagger} e^{iE_q(t_2 - t_0)} \right) \right\}$$

e verificando os termos não nulos obtém-se finalmente,

$$\{\hat{s}_{k\sigma}(t_1), \hat{s}_{q\mu}(t_2)\} = \delta_{kq} \delta_{\sigma\bar{\mu}} \frac{\operatorname{sen} 2\alpha_k}{2} \left(\operatorname{sgn}(\sigma) e^{iE_k(t_1 - t_2)} + \operatorname{sgn}(\bar{\sigma}) e^{-iE_k(t_1 - t_2)} \right)$$

$$\{\hat{s}_{k\sigma}(t_1), \hat{s}_{q\mu}(t_2)\} = \delta_{kq} \delta_{\sigma\bar{\mu}} \operatorname{sgn}(\sigma) \frac{\operatorname{sen} 2\alpha_k}{2} \left(e^{iE_k(t_1 - t_2)} - e^{-iE_k(t_1 - t_2)} \right)$$
(B.1.7)

e tomando o adjunto é possível obter a segunda relação necessária,

$$\{\hat{s}_{k\sigma}^{\dagger}(t_1), \hat{s}_{q\mu}^{\dagger}(t_2)\} = \delta_{kq} \delta_{\sigma\bar{\mu}} \operatorname{sgn}(\sigma) \frac{\operatorname{sen} 2\alpha_k}{2} \left(e^{-iE_k(t_1 - t_2)} - e^{iE_k(t_1 - t_2)} \right)$$
(B.1.8)

Tendo em vista que $\cos \alpha_k = \sqrt{\frac{1}{2} \left(1 - \frac{\epsilon_k}{E_k}\right)}$ e sen $\alpha_k = \sqrt{\frac{1}{2} \left(1 + \frac{\epsilon_k}{E_k}\right)}$ pode-se escrever,

$$\cos^2 \alpha_k e^{\pm iE_kT} + \sin^2 \alpha_k e^{\mp iE_kT} = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\epsilon_k}{E_k} \right) e^{\pm iE_kT} + \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\epsilon_k}{E_k} \right) e^{\mp iE_kT}$$
$$= \frac{1}{2} \left(e^{\pm iE_kT} + e^{\mp iE_kT} \right) \mp \frac{i\epsilon_k}{2iE_k} \left(e^{iE_kT} - e^{-iE_kT} \right)$$

portanto,

$$\cos^2 \alpha_k e^{\pm iE_kT} + \sin^2 \alpha_k e^{\mp iE_kT} = \cos E_kT + A \sin E_kT$$
(B.1.9)

onde foi definido,

$$A \equiv \mp \frac{i\epsilon_k}{2E_k}$$
 e $T \equiv t_1 - t_2$

Agora será considerada a seguinte relação,

$$\frac{\operatorname{sen} 2\alpha_k}{2} \left(e^{\mp iE_kT} - e^{\pm iE_kT} \right) = \mp 2i \operatorname{sen} \alpha_k \cos \alpha_k \operatorname{sen} E_kT$$

e substituindo $\alpha_k,$ tem-se que,

$$\frac{\operatorname{sen} 2\alpha_k}{2} \left(e^{\mp iE_kT} - e^{\pm iE_kT} \right) = \mp i \sqrt{1 - \frac{\epsilon_k^2}{E_k^2}} \operatorname{sen} E_k T$$

o que pode ser escrito na seguinte forma,

$$\frac{\operatorname{sen} 2\alpha_k}{2} \left(e^{\pm iE_kT} - e^{\pm iE_kT} \right) = B \operatorname{sen} E_kT$$

onde,

$$B = \mp i \frac{\Delta}{E_k}$$

Com isso as equações (B.1.5), (B.1.6), (B.1.7) e (B.1.8), podem ser escritas da seguinte forma,

$$\{\hat{s}_{k\sigma}(t_1), \hat{s}_{q\mu}^{\dagger}(t_2)\} = \delta_{\sigma\mu}\delta_{kq} \left(\cos E_k T + \frac{i\epsilon_k}{2E_k} \operatorname{sen} E_k T\right) = \delta_{\sigma\mu}\delta_{kq}F_1^{\dagger}$$
(B.1.10a)

$$\{\hat{s}_{k\sigma}^{\dagger}(t_1), \hat{s}_{q\mu}(t_2)\} = \delta_{\sigma\mu}\delta_{kq}\left(\cos E_kT - \frac{i\epsilon_k}{2E_k}\operatorname{sen} E_kT\right) = \delta_{\sigma\mu}\delta_{kq}F_1^{-}$$
(B.1.10b)

$$\{\hat{s}_{k\sigma}(t_1), \hat{s}_{q\mu}(t_2)\} = \delta_{kq} \delta_{\sigma\bar{\mu}} \operatorname{sgn}(\sigma) i \frac{\Delta}{E_k} \operatorname{sen} E_k T = \delta_{kq} \delta_{\sigma\bar{\mu}} \operatorname{sgn}(\sigma) F_3^+$$
(B.1.10c)

$$\{\hat{s}_{k\sigma}^{\dagger}(t_1), \hat{s}_{q\mu}^{\dagger}(t_2)\} = -\delta_{kq}\delta_{\sigma\bar{\mu}}\mathrm{sgn}(\sigma)i\frac{\Delta}{E_k}\mathrm{sen}\,E_kT = -\delta_{kq}\delta_{\sigma\bar{\mu}}\mathrm{sgn}(\sigma)F_3^{+} \tag{B.1.10d}$$

onde foram definidas as funções

$$F_1^{\pm} = \cos E_k T \pm \frac{i\epsilon_k}{2E_k} \operatorname{sen} E_k T \tag{B.1.11}$$

$$F_3^+ = i\frac{\Delta}{E_k}\operatorname{sen} E_k T \tag{B.1.12}$$

Retomando a representação matricial para a função de Green, será considerado o cálculo explícito da função de Green retardada:

$$\begin{split} \mathbf{g}_{s,kq}^{r}(t_{1},t_{2}) &= -i\vartheta(T) \times \\ & \left(\langle \{\hat{s}_{k\uparrow}(t_{1}), \hat{s}_{q\uparrow}^{\dagger}(t_{2})\} \rangle \quad \langle \{\hat{s}_{k\uparrow}(t_{1}), \hat{s}_{q\downarrow}(t_{2})\} \rangle \quad \langle \{\hat{s}_{k\uparrow}(t_{1}), \hat{s}_{q\downarrow}^{\dagger}(t_{2})\} \rangle \quad \langle \{\hat{s}_{k\uparrow}(t_{1}), \hat{s}_{q\uparrow}(t_{2})\} \rangle \\ & \left\langle \{\hat{s}_{k\downarrow}^{\dagger}(t_{1}), \hat{s}_{q\uparrow}^{\dagger}(t_{2})\} \rangle \quad \langle \{\hat{s}_{k\downarrow}^{\dagger}(t_{1}), \hat{s}_{q\downarrow}(t_{2})\} \rangle \quad \langle \{\hat{s}_{k\downarrow}^{\dagger}(t_{1}), \hat{s}_{q\uparrow}(t_{2})\} \rangle \\ & \left\langle \{\hat{s}_{k\downarrow}(t_{1}), \hat{s}_{q\uparrow}^{\dagger}(t_{2})\} \rangle \quad \langle \{\hat{s}_{k\downarrow}(t_{1}), \hat{s}_{q\downarrow}(t_{2})\} \rangle \quad \langle \{\hat{s}_{k\downarrow}(t_{1}), \hat{s}_{q\downarrow}(t_{2})\} \rangle \quad \langle \{\hat{s}_{k\downarrow}(t_{1}), \hat{s}_{q\uparrow}(t_{2})\} \rangle \\ & \left\langle \{\hat{s}_{k\downarrow}(t_{1}), \hat{s}_{q\uparrow}^{\dagger}(t_{2})\} \rangle \quad \langle \{\hat{s}_{k\downarrow}(t_{1}), \hat{s}_{q\downarrow}(t_{2})\} \rangle \quad \langle \{\hat{s}_{k\downarrow}(t_{1}), \hat{s}_{q\downarrow}(t_{2})\} \rangle \quad \langle \{\hat{s}_{k\uparrow}(t_{1}), \hat{s}_{q\uparrow}(t_{2})\} \rangle \\ & \left\langle \{\hat{s}_{k\uparrow}^{\dagger}(t_{1}), \hat{s}_{q\uparrow}^{\dagger}(t_{2})\} \rangle \quad \langle \{\hat{s}_{k\uparrow}^{\dagger}(t_{1}), \hat{s}_{q\downarrow}(t_{2})\} \rangle \quad \langle \{\hat{s}_{k\uparrow}^{\dagger}(t_{1}), \hat{s}_{q\uparrow}(t_{2})\} \rangle \\ & \left\langle \hat{s}_{k\uparrow}^{\dagger}(t_{1}), \hat{s}_{q\uparrow}^{\dagger}(t_{2})\} \rangle \quad \langle \{\hat{s}_{k\uparrow}^{\dagger}(t_{1}), \hat{s}_{q\downarrow}(t_{2})\} \rangle \quad \langle \{\hat{s}_{k\uparrow}^{\dagger}(t_{1}), \hat{s}_{q\uparrow}(t_{2})\} \rangle \\ & \left\langle \hat{s}_{k\uparrow}^{\dagger}(t_{1}), \hat{s}_{q\uparrow}^{\dagger}(t_{2})\} \rangle \quad \langle \{\hat{s}_{k\uparrow}^{\dagger}(t_{1}), \hat{s}_{q\downarrow}(t_{2})\} \rangle \quad \langle \{\hat{s}_{k\uparrow}^{\dagger}(t_{1}), \hat{s}_{q\uparrow}(t_{2})\} \rangle \\ & \left\langle \hat{s}_{k\uparrow}^{\dagger}(t_{1}), \hat{s}_{q\uparrow}^{\dagger}(t_{2})\} \rangle \quad \langle \{\hat{s}_{k\uparrow}^{\dagger}(t_{1}), \hat{s}_{q\downarrow}(t_{2})\} \rangle \quad \langle \{\hat{s}_{k\uparrow}^{\dagger}(t_{1}), \hat{s}_{q\uparrow}(t_{2})\} \rangle \\ & \left\langle \hat{s}_{k\uparrow}^{\dagger}(t_{1}), \hat{s}_{q\uparrow}^{\dagger}(t_{2})\} \rangle \quad \langle \{\hat{s}_{k\uparrow}^{\dagger}(t_{1}), \hat{s}_{q\downarrow}(t_{2})\} \rangle \quad \langle \{\hat{s}_{k\uparrow}^{\dagger}(t_{1}), \hat{s}_{q\uparrow}(t_{2})\} \rangle \\ & \left\langle \hat{s}_{k\uparrow}^{\dagger}(t_{1}), \hat{s}_{q\uparrow}^{\dagger}(t_{2})\} \rangle \quad \langle \{\hat{s}_{k\uparrow}^{\dagger}(t_{1}), \hat{s}_{q\downarrow}(t_{2})\} \rangle \quad \langle \{\hat{s}_{k\downarrow}^{\dagger}(t_{1}), \hat{s}_{q\downarrow}^{\dagger}(t_{2})\} \rangle \\ & \left\langle \hat{s}_{k\uparrow}^{\dagger}(t_{1}), \hat{s}_{q\uparrow}^{\dagger}(t_{2})\} \rangle \quad \langle \{\hat{s}_{k\uparrow}^{\dagger}(t_{1}), \hat{s}_{q\downarrow}^{\dagger}(t_{2})\} \rangle \quad \langle \{\hat{s}_{k\uparrow}^{\dagger}(t_{1}), \hat{s}_{q\downarrow}^{\dagger}(t_{2})\} \rangle \\ & \left\langle \hat{s}_{k\downarrow}^{\dagger}(t_{1}), \hat{s}_{q\downarrow}^{\dagger}(t_{2})\} \rangle \quad \langle \{\hat{s}_{k\uparrow}^{\dagger}(t_{1}), \hat{s}_{q\downarrow}^{\dagger}(t_{2})\} \rangle \quad \langle \{\hat{s}_{k\downarrow}^{\dagger}(t_{1}), \hat{s}_{q\downarrow}^{\dagger}(t_{2})\} \rangle \\ & \left\langle \hat{s}_{k\downarrow}^{\dagger}(t_{1}), \hat{s}_{q\downarrow}^{\dagger}(t_{2})\} \rangle \quad \langle \hat{s}_{k\downarrow}^{\dagger}(t_{1}), \hat{s}_{q\downarrow}^{\dagger}(t_{2})\} \rangle$$

Usando-se os resultados (B.1.10) para determinar os anticomutadores, pode-se escrever $\mathbf{g}_{s,kq}^{r}(t_1, t_2)$ na seguinte forma,

$$\mathbf{g}_{s,kq}^{r}(t_{1},t_{2}) = -i\delta_{kq} \begin{pmatrix} \vartheta(T)F_{1}^{+} & \vartheta(T)F_{3}^{+} & 0 & 0\\ \vartheta(T)F_{3}^{+} & \vartheta(T)F_{1}^{-} & 0 & 0\\ 0 & 0 & \vartheta(T)F_{1}^{+} & -\vartheta(T)F_{3}^{+}\\ 0 & 0 & -\vartheta(T)F_{3}^{+} & \vartheta(T)F_{1}^{-} \end{pmatrix}$$

E tomando a soma sobre $k \in q$, segue que,

$$\mathbf{g}_{s}^{r}(t_{1},t_{2}) = -i\sum_{k} \begin{pmatrix} \vartheta(T)F_{1}^{+} & \vartheta(T)F_{3}^{+} & 0 & 0 \\ \vartheta(T)F_{3}^{+} & \vartheta(T)F_{1}^{-} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \vartheta(T)F_{1}^{+} & -\vartheta(T)F_{3}^{+} \\ 0 & 0 & -\vartheta(T)F_{3}^{+} & \vartheta(T)F_{1}^{-} \end{pmatrix}$$

Aqui é conveniente transformar a soma em k em uma integração. Isto pode ser feito usando-se a densidade de estados $N(\epsilon)$ do supercondutor no estado normal. Deste modo tem-se que $\sum_k \Rightarrow \int d\epsilon N(\epsilon)$ e aproximando $N(\epsilon)$ para seu valor no nível de Fermi, tem-se que,

$$\mathbf{g}_{s}^{r}(t_{1},t_{2}) = -iN(\epsilon_{F}) \begin{pmatrix} \int d\epsilon_{k}\vartheta(T)F_{1}^{+} & \int d\epsilon_{k}\vartheta(T)F_{3}^{+} & 0 & 0 \\ \int d\epsilon_{k}\vartheta(T)F_{3}^{+} & \int d\epsilon_{k}\vartheta(T)F_{1}^{-} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \int d\epsilon_{k}\vartheta(T)F_{1}^{+} & -\int d\epsilon_{k}\vartheta(T)F_{3}^{+} \\ 0 & 0 & -\int d\epsilon_{k}\vartheta(T)F_{3}^{+} & \int d\epsilon_{k}\vartheta(T)F_{1}^{-} \end{pmatrix}.$$

As integrais são calculadas explicitamente no apêndice C, e os resultados são dados por,

$$\int_{-\infty}^{+\infty} d\epsilon_k \vartheta(T) F_1^{\pm} = \frac{1}{2} \int d\omega \ e^{-i\omega T} \varrho(\omega)$$
$$\mp \int_{-\infty}^{+\infty} d\epsilon_k \vartheta(T) F_3^{\pm} = \pm \frac{1}{2} \int d\omega \ e^{-i\omega T} \frac{\Delta}{\omega} \varrho(\omega)$$

e substituindo estes resultados em $\mathbf{g}_{s}^{r}(t_{1},t_{2})$ tem-se que,

$$\mathbf{g}_{s}^{r}(t_{1},t_{2}) = -\frac{i}{2}N(\epsilon_{F})\int d\omega \ e^{-i\omega(t_{1}-t_{2})}\varrho(\omega) \begin{pmatrix} 1 & -\frac{\Delta}{\omega} & 0 & 0\\ -\frac{\Delta}{\omega} & 1 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 1 & \frac{\Delta}{\omega}\\ 0 & 0 & \frac{\Delta}{\omega} & 1 \end{pmatrix}$$

Agora considerando o fato de que a função de Green apenas depende da diferença de tempos entre $t_1 - t_2$, pode-se escrever,

$$\mathbf{g}_{s}^{r}(t_{1},t_{2}) = \int e^{-i\omega(t_{1}-t_{2})} \mathbf{g}_{s}^{r}(\omega) \ \frac{d\omega}{2\pi}$$

e substituindo na equação anterior tem-se que,

$$\int \frac{d\omega}{2\pi} e^{-i\omega(t_1-t_2)} \mathbf{g}_s^r(\omega) = -\frac{i}{2} N(\epsilon_F) \int d\omega \ e^{-i\omega(t_1-t_2)} \varrho(\omega) \begin{pmatrix} 1 & -\frac{\Delta}{\omega} & 0 & 0\\ -\frac{\Delta}{\omega} & 1 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 1 & \frac{\Delta}{\omega}\\ 0 & 0 & \frac{\Delta}{\omega} & 1 \end{pmatrix}$$

o que permite escrever finalmente,

$$\mathbf{g}_{s}^{r}(\omega) = -i\pi N(\epsilon_{F})\varrho(\omega) \begin{pmatrix} 1 & -\frac{\Delta}{\omega} & 0 & 0\\ -\frac{\Delta}{\omega} & 1 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 1 & \frac{\Delta}{\omega}\\ 0 & 0 & \frac{\Delta}{\omega} & 1 \end{pmatrix}.$$
 (B.1.13)

Adotando o mesmo procedimento para a função de Green avançada, segue da definição que,

$$\mathbf{g}_{s}^{a}(t_{1},t_{2}) = iN(\epsilon_{F}) \begin{pmatrix} \int d\epsilon_{k}\vartheta(-T)F_{1}^{+} & \int d\epsilon_{k}\vartheta(-T)F_{3}^{+} & 0 & 0\\ \int d\epsilon_{k}\vartheta(-T)F_{3}^{+} & \int d\epsilon_{k}\vartheta(-T)F_{1}^{-} & 0 & 0\\ 0 & 0 & \int d\epsilon_{k}\vartheta(-T)F_{1}^{+} & -\int d\epsilon_{k}\vartheta(-T)F_{3}^{+}\\ 0 & 0 & -\int d\epsilon_{k}\vartheta(-T)F_{3}^{+} & \int d\epsilon_{k}\vartheta(-T)F_{1}^{-} \end{pmatrix}$$

e usando os resultados do apêndice C as integrações em ϵ_k podem ser trocadas pelas integrações em ω , assim segue que,

$$\mathbf{g}_{s}^{a}(t_{1},t_{2}) = \frac{i}{2}N(\epsilon_{F})\int d\omega \ e^{-i\omega(t_{1}-t_{2})}[\varrho(\omega)]^{*} \begin{pmatrix} 1 & -\frac{\Delta}{\omega} & 0 & 0 \\ -\frac{\Delta}{\omega} & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & \frac{\Delta}{\omega} \\ 0 & 0 & \frac{\Delta}{\omega} & 1 \end{pmatrix}$$

e a transformada de Fourier de $\mathbf{g}_s^a(\omega)$ é dada por,

$$\mathbf{g}_{s}^{a}(\omega) = i\pi N(\epsilon_{F})[\varrho(\omega)]^{*} \begin{pmatrix} 1 & -\frac{\Delta}{\omega} & 0 & 0\\ -\frac{\Delta}{\omega} & 1 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 1 & \frac{\Delta}{\omega} \\ 0 & 0 & \frac{\Delta}{\omega} & 1 \end{pmatrix}.$$
 (B.1.14)

Nota-se das equações (B.1.13) a (B.1.14) que as funções de Green obedecem a seguinte relação,

$$\mathbf{g}_s^a(\omega) = [\mathbf{g}_s^r(\omega)]^{\dagger}. \tag{B.1.15}$$

A auto-energia avançada/retardada é definida da seguinte forma,

$$\begin{split} \boldsymbol{\Sigma}_{R}^{r/a}(t_{1},t_{2}) &= \sum_{k} \mathbf{t}_{s}^{\dagger} \mathbf{g}_{s,k}^{r/a}(t_{1},t_{2}) \mathbf{t}_{s} = \\ &= \mp i \sum_{k} \begin{pmatrix} t_{s}^{*} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -t_{s} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & t_{s}^{*} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -t_{s} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \vartheta(T)F_{1}^{+} & \vartheta(T)F_{3}^{+} & 0 & 0 \\ \vartheta(T)F_{3}^{+} & \vartheta(T)F_{1}^{-} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \vartheta(T)F_{1}^{+} & -\vartheta(T)F_{3}^{+} \\ 0 & 0 & -\vartheta(T)F_{3}^{+} & \vartheta(T)F_{1}^{-} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} t_{s} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -t_{s}^{*} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & t_{s} & 0 \\ 0 & 0 & -t_{s}^{*} \end{pmatrix} \end{split}$$

Assim como é realizado na literatura [92], será considerado que a amplitude de tunelamento é uma constante e após efetuar a multiplicação matricial, pode-se escrever $\Sigma_R^{r/a}$ na seguinte forma:

$$\boldsymbol{\Sigma}_{R}^{r/a}(t_{1},t_{2}) = \sum_{k} \mathbf{t}_{s}^{\dagger} \mathbf{g}_{s,k}^{r/a}(t_{1},t_{2}) \mathbf{t}_{s} = \mp i |t_{s}|^{2} \sum_{k} \begin{pmatrix} \vartheta(\mp T)F_{1}^{+} & \vartheta(\mp T)F_{3}^{+} & 0 & 0 \\ \vartheta(\mp T)F_{3}^{+} & \vartheta(\mp T)F_{1}^{-} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \vartheta(\mp T)F_{1}^{+} & -\vartheta(\mp T)F_{3}^{+} \\ 0 & 0 & -\vartheta(\mp T)F_{3}^{+} & \vartheta(\mp T)F_{1}^{-} \end{pmatrix}$$

e trocando a soma em k por uma integração e usando as relações obtidas no apêndice as funções de Green podem ser reescritas na forma dada pelas equações (B.1.13) e (B.1.14). Desde que estas funções de Green podem ser obtidas uma da outra através da operação de adjunto, então para o caso particular de $\Sigma_R^r(t_1, t_2)$ tem-se que,

$$\boldsymbol{\Sigma}_{R}^{r}(t_{1},t_{2}) = -\frac{i}{2}|t_{s}|^{2}N(\epsilon_{F})\int d\omega \ e^{-i\omega(t_{1}-t_{2})}\varrho(\omega) \begin{pmatrix} 1 & -\frac{\Delta}{\omega} & 0 & 0\\ -\frac{\Delta}{\omega} & 1 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 1 & \frac{\Delta}{\omega}\\ 0 & 0 & \frac{\Delta}{\omega} & 1 \end{pmatrix}$$

Tomando a transformada de Fourier de $\Sigma_R^r(t_1, t_2)$ pode-se escrever o primeiro membro da seguinte forma,

$$\int \frac{d\omega}{2\pi} e^{-i\omega(t_1-t_2)} \mathbf{\Sigma}_R^r(\omega) = -\frac{i}{2} |t_s|^2 N(\epsilon_F) \int d\omega \ e^{-i\omega(t_1-t_2)} \varrho(\omega) \begin{pmatrix} 1 & -\frac{\Delta}{\omega} & 0 & 0\\ -\frac{\Delta}{\omega} & 1 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 1 & \frac{\Delta}{\omega} \\ 0 & 0 & \frac{\Delta}{\omega} & 1 \end{pmatrix}$$

e agrupando os termos semelhantes, tem-se que,

$$\boldsymbol{\Sigma}_{R}^{r}(\omega) = -i\pi |t_{s}|^{2} N(\epsilon_{F}) \varrho(\omega) \begin{pmatrix} 1 & -\frac{\Delta}{\omega} & 0 & 0\\ -\frac{\Delta}{\omega} & 1 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 1 & \frac{\Delta}{\omega}\\ 0 & 0 & \frac{\Delta}{\omega} & 1 \end{pmatrix}$$

Aqui é conveniente definir a constante de acoplamento com o supercondutor Γ_s que será um parâmetro que descreve o acoplamento entre o ponto quântico e o eletrodo supercondutor. Assim,

$$\Gamma_s = 2\pi |t_s|^2 N(\epsilon_F) \tag{B.1.16}$$

O que permite escrever a auto-energia retardada na forma final,

$$\boldsymbol{\Sigma}_{R}^{r}(\omega) = -\frac{i}{2}\Gamma_{s}\varrho(\omega) \begin{pmatrix} 1 & -\frac{\Delta}{\omega} & 0 & 0\\ -\frac{\Delta}{\omega} & 1 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 1 & \frac{\Delta}{\omega}\\ 0 & 0 & \frac{\Delta}{\omega} & 1 \end{pmatrix}$$

lembrando que $\rho(\omega)$ é densidade generalizada de estados do supercondutor (ver apêndice C),

$$\varrho(\omega) = \frac{|\omega|\vartheta(|\omega| - \Delta)}{\sqrt{\omega^2 - \Delta^2}} - \frac{i\omega\vartheta(\Delta - |\omega|)}{\sqrt{\Delta^2 - \omega^2}}$$
(B.1.17)

estendida para a região proibida na teoria BCS $|\omega| < \Delta$ dentro da qual o processo de reflexão de Andreev ocorre conforme mostrado na teoria de Tinkham-Blonder & Klapwijk [107]. Quando $|\omega| < \Delta$, a densidade de estados é imaginária pura indicando estados evanescentes no gap os quais decaem em pares de Cooper do condensado supercondutor.

A auto-energia avançada é obtida tomando-se o adjunto de $\boldsymbol{\Sigma}_{R}^{r}(\omega),$ assim,

$$\boldsymbol{\Sigma}_{R}^{a}(\omega) = \frac{i}{2} \Gamma_{s}[\varrho(\omega)]^{*} \begin{pmatrix} 1 & -\frac{\Delta}{\omega} & 0 & 0\\ -\frac{\Delta}{\omega} & 1 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 1 & \frac{\Delta}{\omega}\\ 0 & 0 & \frac{\Delta}{\omega} & 1 \end{pmatrix}$$

B.2 Função de Green e auto-energia do eletrodo ferromagnético

Nesta seção será determinada a função de Green e auto-energia para um ferromagneto com uma magnetização em uma direção arbitrária θ . A função de Green retardada na notação de Nambu

generalizada para o caso ferromagnético é dada por,

$$\mathbf{g}_{2}^{r/a}(t_{1},t_{2}) = \sum_{kq} \mathbf{g}_{2,kq}^{r/a}(t_{1},t_{2}) = \mp i\vartheta(\pm t_{1} \mp t_{2}) \sum_{kq} \langle [\hat{\mathbf{\Phi}}_{2k}(t_{1}) \otimes \hat{\mathbf{\Phi}}_{2q}^{\dagger}(t_{2}) + \hat{\mathbf{\Phi}}_{2q}^{\dagger}(t_{2}) \otimes \hat{\mathbf{\Phi}}_{2k}(t_{1})] \rangle$$

onde $\hat{\Phi}_{2k} = (\hat{b}_{k\uparrow}^{\dagger} \ \hat{b}_{k\downarrow} \ \hat{b}_{k\downarrow}^{\dagger} \ \hat{b}_{k\uparrow})^{\dagger}$. Explicitamente, pode-se escrever,

$$\begin{aligned} \mathbf{g}_{2,kq}^{r/a}(t_{1},t_{2}) &= \mp i\vartheta(\pm t_{1} \mp t_{2}) \times \\ \times \begin{pmatrix} \langle \hat{b}_{k\uparrow}(t_{1}), \hat{b}_{q\uparrow}^{\dagger}(t_{2}) \rangle & \langle \{\hat{b}_{k\uparrow}(t_{1}), \hat{b}_{q\downarrow}(t_{2}) \rangle \rangle & \langle \{\hat{b}_{k\uparrow}(t_{1}), \hat{b}_{q\downarrow}^{\dagger}(t_{2}) \rangle \rangle & \langle \{\hat{b}_{k\uparrow}(t_{1}), \hat{b}_{q\uparrow}^{\dagger}(t_{2}) \rangle \rangle \\ \langle \{\hat{b}_{k\downarrow}^{\dagger}(t_{1}), \hat{b}_{q\uparrow}^{\dagger}(t_{2}) \rangle & \langle \{\hat{b}_{k\downarrow}^{\dagger}(t_{1}), \hat{b}_{q\downarrow}(t_{2}) \rangle \rangle & \langle \{\hat{b}_{k\downarrow}^{\dagger}(t_{1}), \hat{b}_{q\downarrow}^{\dagger}(t_{2}) \rangle \rangle & \langle \{\hat{b}_{k\downarrow}^{\dagger}(t_{1}), \hat{b}_{q\uparrow}^{\dagger}(t_{2}) \rangle \rangle \\ \langle \{\hat{b}_{k\downarrow}(t_{1}), \hat{b}_{q\uparrow}^{\dagger}(t_{2}) \rangle & \langle \{\hat{b}_{k\downarrow}(t_{1}), \hat{b}_{q\downarrow}(t_{2}) \rangle \rangle & \langle \{\hat{b}_{k\downarrow}(t_{1}), \hat{b}_{q\uparrow}^{\dagger}(t_{2}) \rangle \rangle & \langle \{\hat{b}_{k\downarrow}(t_{1}), \hat{b}_{q\uparrow}(t_{2}) \rangle \rangle \\ \langle \{\hat{b}_{k\uparrow}^{\dagger}(t_{1}), \hat{b}_{q\uparrow}^{\dagger}(t_{2}) \rangle & \langle \{\hat{b}_{k\uparrow}^{\dagger}(t_{1}), \hat{b}_{q\downarrow}(t_{2}) \rangle \rangle & \langle \{\hat{b}_{k\uparrow}^{\dagger}(t_{1}), \hat{b}_{q\uparrow}(t_{2}) \rangle \rangle \end{pmatrix} \end{pmatrix} \end{aligned}$$

O Hamiltoniano para o ferromagneto isolado é o dado na equação (3.1.3), i.e.,

$$\hat{H}_F = \sum_{k\sigma} [\epsilon_k - \operatorname{sgn}(\sigma)h\cos\theta - \mu_F] b^{\dagger}_{k\sigma} b_{k\sigma} - \sum_{k\sigma} h\sin\theta b^{\dagger}_{k\sigma} b_{k\bar{\sigma}}$$

que determina a evolução temporal dos operadores $b_{k\sigma}$. Seguindo os procedimentos adotados para o caso do supercondutor, será realizada a diagonalização do Hamiltoniano aplicando-se uma transformação de Bogoliubov, a qual é dada por,

$$\hat{b}_{k\sigma}(t) = \cos\frac{\theta}{2}\hat{\varphi}_{k\sigma}(t) - \operatorname{sgn}(\sigma)\sin\frac{\theta}{2}\hat{\varphi}_{k\bar{\sigma}}(t)$$
(B.2.1)

e o Hamiltoniano possa ser escrito na forma,

$$\hat{H}_2 = \sum_{k\sigma} \varepsilon_{k\sigma} \hat{\varphi}_{k\sigma}^{\dagger} \hat{\varphi}_{k\sigma}$$

onde,

$$\varepsilon_{k\sigma} = \epsilon_k - \operatorname{sgn}(\sigma)h - \mu_2$$

A evolução temporal dos operadores $\hat{\varphi}$ é simples e dada por,

$$\hat{\varphi}_{k\sigma}(t) = \hat{\varphi}_{k\sigma}(t_0) e^{i\varepsilon_{k\sigma}(t-t_0)}$$

Substituindo (B.2.2), tem-se que,

$$\hat{b}_{k\sigma}(t) = \cos\frac{\theta}{2} e^{i\varepsilon_{k\sigma}(t-t_0)} \hat{\varphi}_{k\sigma}(t_0) - \operatorname{sgn}(\sigma) \operatorname{sen}\frac{\theta}{2} e^{i\varepsilon_{k\bar{\sigma}}(t-t_0)} \hat{\varphi}_{k\bar{\sigma}}(t_0)$$
(B.2.2)

A equação para a evolução temporal do operador de criação é dada por,

$$\hat{b}_{k\sigma}^{\dagger}(t) = \cos\frac{\theta}{2}e^{-i\varepsilon_{k\sigma}(t-t_0)}\hat{\varphi}_{k\sigma}^{\dagger}(t_0) - \operatorname{sgn}(\sigma)\operatorname{sen}\frac{\theta}{2}e^{-i\varepsilon_{k\bar{\sigma}}(t-t_0)}\hat{\varphi}_{k\bar{\sigma}}^{\dagger}(t_0)$$
(B.2.3)

A primeira relação de anti-comutação é dada por,

$$\{\hat{b}_{k\sigma}^{\dagger}(t_1), \hat{b}_{q\mu}(t_2)\} = \left\{ \left(\cos\frac{\theta}{2} e^{-i\varepsilon_{k\sigma}(t_1 - t_0)} \hat{\varphi}_{k\sigma}^{\dagger}(t_0) - \operatorname{sgn}(\sigma) \operatorname{sen}\frac{\theta}{2} e^{-i\varepsilon_{k\sigma}(t_1 - t_0)} \hat{\varphi}_{k\bar{\sigma}}^{\dagger}(t_0) \right) \\ , \left(\cos\frac{\theta}{2} e^{i\varepsilon_{q\mu}(t_2 - t_0)} \hat{\varphi}_{q\mu}(t_0) - \operatorname{sgn}(\mu) \operatorname{sen}\frac{\theta}{2} e^{i\varepsilon_{q\bar{\mu}}(t_2 - t_0)} \hat{\varphi}_{q\bar{\mu}}(t_0) \right) \right\}$$

e considerando a propriedade distributiva dos operadores e levando em conta que os operadores $\varphi_{q\bar{\mu}}$ obedecem as relações de anti-comutação para férmions, tem-se que,

$$\begin{aligned} \{\hat{b}_{k\sigma}^{\dagger}(t_{1}), \hat{b}_{q\mu}(t_{2})\} &= \cos\frac{\theta}{2} e^{-i\varepsilon_{k\sigma}(t_{1}-t_{0})} \cos\frac{\theta}{2} e^{i\varepsilon_{q\mu}(t_{2}-t_{0})} \{\hat{\varphi}_{k\sigma}^{\dagger}(t_{0}), \hat{\varphi}_{q\mu}(t_{0})\} \\ &- \cos\frac{\theta}{2} e^{-i\varepsilon_{k\sigma}(t_{1}-t_{0})} \mathrm{sgn}(\mu) \mathrm{sen} \frac{\theta}{2} e^{i\varepsilon_{q\mu}(t_{2}-t_{0})} \{\hat{\varphi}_{k\sigma}^{\dagger}(t_{0}), \hat{\varphi}_{q\bar{\mu}}(t_{0})\} \\ &- \mathrm{sgn}(\sigma) \mathrm{sen} \frac{\theta}{2} e^{-i\varepsilon_{k\bar{\sigma}}(t_{1}-t_{0})} \cos\frac{\theta}{2} e^{i\varepsilon_{q\mu}(t_{2}-t_{0})} \{\hat{\varphi}_{k\bar{\sigma}}^{\dagger}(t_{0}), \hat{\varphi}_{q\mu}(t_{0})\} \\ &+ \mathrm{sgn}(\sigma) \mathrm{sen} \frac{\theta}{2} e^{-i\varepsilon_{k\bar{\sigma}}(t_{1}-t_{0})} \mathrm{sgn}(\mu) \mathrm{sen} \frac{\theta}{2} e^{i\varepsilon_{q\bar{\mu}}(t_{2}-t_{0})} \{\hat{\varphi}_{k\bar{\sigma}}^{\dagger}(t_{0}), \hat{\varphi}_{q\bar{\mu}}(t_{0})\} \end{aligned}$$

ou seja,

$$\{\hat{b}_{k\sigma}^{\dagger}(t_{1}),\hat{b}_{q\mu}(t_{2})\} = \delta_{kq}\delta_{\sigma\mu}\cos^{2}\frac{\theta}{2}e^{-i\varepsilon_{k\sigma}(t_{1}-t_{2})} - \delta_{kq}\delta_{\sigma\bar{\mu}}\mathrm{sgn}(\bar{\sigma})\cos\frac{\theta}{2}\sin\frac{\theta}{2}e^{-i\varepsilon_{k\sigma}(t_{1}-t_{2})} - \delta_{kq}\delta_{\sigma\mu}\mathrm{sgn}(\bar{\sigma})\sin\frac{\theta}{2}\cos\frac{\theta}{2}e^{-i\varepsilon_{k\bar{\sigma}}(t_{1}-t_{2})} + \delta_{kq}\delta_{\sigma\mu}\sin^{2}\frac{\theta}{2}e^{-i\varepsilon_{k\bar{\sigma}}(t_{1}-t_{2})}$$

e agrupando os termos semelhantes pode-se se escrever ainda,

$$\{\hat{b}_{k\sigma}^{\dagger}(t_1), \hat{b}_{q\mu}(t_2)\} = \delta_{kq} \delta_{\sigma\mu} \left(\cos^2 \frac{\theta}{2} e^{-i\varepsilon_{k\sigma}(t_1 - t_2)} + \sin^2 \frac{\theta}{2} e^{-i\varepsilon_{k\bar{\sigma}}(t_1 - t_2)} \right) \\ - \delta_{kq} \delta_{\sigma\bar{\mu}} \sin \frac{\theta}{2} \cos \frac{\theta}{2} \left(\operatorname{sgn}(\bar{\sigma}) e^{-i\varepsilon_{k\sigma}(t_1 - t_2)} + \operatorname{sgn}(\sigma) e^{-i\varepsilon_{k\bar{\sigma}}(t_1 - t_2)} \right)$$
(B.2.4)

A próxima relação de anti-comutação que deve ser determinada é entre dois operadores de criação e de aniquilação. Desta forma, tem-se que,

$$\{\hat{b}_{k\sigma}(t_1), \hat{b}_{q\mu}(t_2)\} = \left\{ \left(\cos\frac{\theta}{2} e^{i\varepsilon_{k\sigma}(t-t_0)} \hat{\varphi}_{k\sigma}(t_0) - \operatorname{sgn}(\sigma) \operatorname{sen}\frac{\theta}{2} e^{i\varepsilon_{k\bar{\sigma}}(t-t_0)} \hat{\varphi}_{k\bar{\sigma}}(t_0) \right) \\ \left(\cos\frac{\theta}{2} e^{i\varepsilon_{q\mu}(t-t_0)} \hat{\varphi}_{q\mu}(t_0) - \operatorname{sgn}(\sigma) \operatorname{sen}\frac{\theta}{2} e^{i\varepsilon_{k\bar{\sigma}}(t-t_0)} \hat{\varphi}_{k\bar{\sigma}}(t_0) \right) \right\},$$

e segue diretamente que,

$$\{\hat{b}_{k\sigma}(t_1), \hat{b}_{q\mu}(t_2)\} = 0,$$

desde que os operadores $\hat{\varphi}_{q\mu}(t_0)$ anti-comutam.

Um cálculo similar mostra que,

$$\{\hat{b}_{k\sigma}^{\dagger}(t_1), \hat{b}_{q\mu}^{\dagger}(t_2)\} = 0.$$

Aplicando as relações de anticomutação obtidas na definição da função de Green retardada, tem-se que,

$$\mathbf{g}_{2}^{r/a}(t_{1},t_{2}) = \mp i\vartheta(\pm T) \times \mathbf{g}_{2}^{r/a}(t_{1},t_{2}) = \mp i\vartheta(\pm T) + \mp i\vartheta(\pm T)$$

onde foi usada a notação $s \equiv \operatorname{sen} \frac{\theta}{2}, c \equiv \cos \frac{\theta}{2} \in T \equiv t_1 - t_2.$

O próximo passo é trocar os termos da forma geral $\vartheta(\pm T)e^{\pm i\varepsilon_k T}$ por sua transformada de Fourier. Usando os resultados do Apêndice C tem-se que,

$$\mp i\vartheta(\pm T)e^{\pm i\varepsilon_{k\sigma}T} = \int \frac{d\omega}{2\pi}e^{-i\omega T}F_{\pm}(\pm\varepsilon_{k\sigma})$$

onde,

$$F_{\pm}(\pm\varepsilon_{k\sigma}) = \frac{1}{\omega \pm \varepsilon_{k\sigma} \pm i\eta}$$

Substituindo este resultado em $\mathbf{g}_{2,kq}^{r/a}(t_1,t_2)$, tem-se que,

$$\mathbf{g}_{2}^{r/a}(t_{1},t_{2}) = \int \frac{d\omega}{2\pi} e^{-i\omega T} \sum_{k} \begin{pmatrix} c^{2}F_{\pm}(\varepsilon_{k\uparrow}) + s^{2}F_{\pm}(\varepsilon_{k\downarrow}) & 0 & -sc[F_{\pm}(\varepsilon_{k\downarrow}) - F_{\pm}(\varepsilon_{k\uparrow})] & 0 \\ 0 & c^{2}F_{\pm}(-\varepsilon_{k\downarrow}) + s^{2}F_{\pm}(-\varepsilon_{k\uparrow}) & 0 & -sc[F_{\pm}(-\varepsilon_{k\downarrow}) - F_{\pm}(-\varepsilon_{k\uparrow})] \\ sc[F_{\pm}(\varepsilon_{k\uparrow}) - F_{\pm}(\varepsilon_{k\downarrow})] & 0 & c^{2}F_{\pm}(\varepsilon_{k\downarrow}) + s^{2}F_{\pm}(\varepsilon_{k\uparrow}) & 0 \\ 0 & sc[F_{\pm}(-\varepsilon_{k\uparrow}) - F_{\pm}(-\varepsilon_{k\downarrow})] & 0 & c^{2}F_{\pm}(-\varepsilon_{k\uparrow}) + s^{2}F_{\pm}(-\varepsilon_{k\downarrow}) \end{pmatrix} \end{pmatrix}$$

Agora é necessário determinar a soma em k sobre as funções $F_{\pm}(-\varepsilon_{k\sigma})$. Assim, de modo geral tem-se que,

$$\sum_{k} F_{\pm}(\pm \varepsilon_{k\sigma}) = \sum_{k} \frac{1}{\omega \pm \varepsilon_{k\sigma} \pm i\eta} = \int_{-\infty}^{+\infty} d\varepsilon_{k\sigma} N_{\sigma}(\varepsilon_{k\sigma}) \frac{1}{\omega \pm \varepsilon_{k\sigma} \pm i\eta}$$

ou ainda,

$$\sum_{k} F_{\pm}(\pm \varepsilon_{k\sigma}) = \int_{-\infty}^{+\infty} d\varepsilon_{k\sigma} N_{\sigma}(\varepsilon_{k\sigma}) \frac{1}{\omega \pm \varepsilon_{k\sigma}} \mp i\pi \int_{-\infty}^{+\infty} d\varepsilon_{k\sigma} N_{\sigma}(\varepsilon_{k\sigma}) \delta(\omega \pm \varepsilon_{k\sigma})$$

Aqui será considerada a aproximação de "banda larga", ou seja, que a banda do ferromagneto para ambos spins apresenta uma largura Ω grande em comparação com a escala de energia do problema. No caso deste trabalho, o gap de energia do supercondutor. Sendo assim, tem-se que,

$$N_{2\sigma}(\varepsilon) = N_{2\sigma}(\epsilon_F)\vartheta(\Omega - |\varepsilon|)$$

e substituindo nas integrais, tem-se que,

$$\sum_{k} F_{\pm}(\pm \varepsilon N_{2k\sigma}) = \pm N_{2\sigma}(\epsilon_F) \ln \left| \frac{\omega \pm \Omega}{\omega \mp \Omega} \right| \mp i\pi N_{2\sigma}(\epsilon_F)$$

desde que está sendo considerado o limite $\Omega>>\omega$ o termo do logaritmo é nulo e o resultado da soma emktoma a forma:

$$\sum_{k} F_{\pm}(\varepsilon N_{2k\sigma}) = \sum_{k} F_{\pm}(-\varepsilon N_{2k\sigma}) = \mp i\pi N_{2\sigma}(\epsilon_F)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{g}_{2}^{r/a}(t_{1},t_{2}) &= \mp i\pi \int \frac{d\omega}{2\pi} e^{-i\omega T} \\ \begin{pmatrix} c^{2}N_{2\uparrow}(\epsilon_{F}) + s^{2}N_{2\downarrow}(\epsilon_{F}) & 0 & sc[N_{2\uparrow}(\epsilon_{F}) - N_{2\downarrow}(\epsilon_{F})] & 0 \\ 0 & c^{2}N_{2\downarrow}(\epsilon_{F}) + s^{2}N_{2\uparrow}(\epsilon_{F}) & 0 & sc[N_{2\uparrow}(\epsilon_{F}) - N_{2\downarrow}(\epsilon_{F})] \\ sc[N_{2\uparrow}(\epsilon_{F}) - N_{2\downarrow}(\epsilon_{F})] & 0 & c^{2}N_{2\downarrow}(\epsilon_{F}) + s^{2}N_{2\uparrow}(\epsilon_{F}) & 0 \\ 0 & sc[N_{2\uparrow}(\epsilon_{F}) - N_{2\downarrow}(\epsilon_{F})] & 0 & c^{2}N_{2\uparrow}(\epsilon_{F}) + s^{2}N_{2\downarrow}(\epsilon_{F}) \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Tomando a transformada de Fourier do primeiro membro tem-se que,

$$\int \frac{d\omega}{2\pi} e^{-i\omega T} \mathbf{g}_{2}^{r/a}(\omega) = \mp i\pi \int \frac{d\omega}{2\pi} e^{-i\omega T}$$

$$\begin{pmatrix} c^{2}N_{2\uparrow}(\epsilon_{F}) + s^{2}N_{2\downarrow}(\epsilon_{F}) & 0 & sc[N_{2\uparrow}(\epsilon_{F}) - N_{2\downarrow}(\epsilon_{F})] & 0 \\ 0 & c^{2}N_{2\downarrow}(\epsilon_{F}) + s^{2}N_{2\uparrow}(\epsilon_{F}) & 0 & sc[N_{2\uparrow}(\epsilon_{F}) - N_{2\downarrow}(\epsilon_{F})] \\ sc[N_{2\uparrow}(\epsilon_{F}) - N_{2\downarrow}(\epsilon_{F})] & 0 & c^{2}N_{2\downarrow}(\epsilon_{F}) + s^{2}N_{2\uparrow}(\epsilon_{F}) & 0 \\ 0 & sc[N_{2\uparrow}(\epsilon_{F}) - N_{2\downarrow}(\epsilon_{F})] & 0 & c^{2}N_{2\downarrow}(\epsilon_{F}) + s^{2}N_{2\downarrow}(\epsilon_{F}) \end{pmatrix}$$

o que implica em:

$$\mathbf{g}_{2}^{r/a}(\omega) = \mp i\pi$$

$$\begin{pmatrix} c^{2}N_{2\uparrow}(\epsilon_{F}) + s^{2}N_{2\downarrow}(\epsilon_{F}) & 0 & sc[N_{2\uparrow}(\epsilon_{F}) - N_{2\downarrow}(\epsilon_{F})] & 0 \\ 0 & c^{2}N_{2\downarrow}(\epsilon_{F}) + s^{2}N_{2\uparrow}(\epsilon_{F}) & 0 & sc[N_{2\uparrow}(\epsilon_{F}) - N_{2\downarrow}(\epsilon_{F})] \\ sc[N_{2\uparrow}(\epsilon_{F}) - N_{2\downarrow}(\epsilon_{F})] & 0 & c^{2}N_{2\downarrow}(\epsilon_{F}) + s^{2}N_{2\uparrow}(\epsilon_{F}) & 0 \\ 0 & sc[N_{2\uparrow}(\epsilon_{F}) - N_{2\downarrow}(\epsilon_{F})] & 0 & c^{2}N_{2\uparrow}(\epsilon_{F}) + s^{2}N_{2\downarrow}(\epsilon_{F}) \end{pmatrix}$$

$$(B.2.5)$$

A auto-energia de acoplamento com o ferromagneto ${\cal F}_2$ pode ser determinada da definição,

$$\boldsymbol{\Sigma}_{2}^{r/a}(\omega) = \mathbf{t}_{2}^{\dagger} \mathbf{g}_{2}^{r/a}(\omega) \mathbf{t}_{2}$$
(B.2.6)

e substituindo a função de Green

$$\begin{split} \boldsymbol{\Sigma}_{2}^{r/a}(\omega) &= \mp i\pi \begin{pmatrix} t_{2}^{*} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -t_{2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & t_{2}^{*} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -t_{2} \end{pmatrix} \times \\ \begin{pmatrix} c^{2}N_{2\uparrow}(\epsilon_{F}) + s^{2}N_{2\downarrow}(\epsilon_{F}) & 0 & sc[N_{2\uparrow}(\epsilon_{F}) - N_{2\downarrow}(\epsilon_{F})] & 0 \\ 0 & c^{2}N_{2\downarrow}(\epsilon_{F}) + s^{2}N_{2\uparrow}(\epsilon_{F}) & 0 & sc[N_{2\uparrow}(\epsilon_{F}) - N_{2\downarrow}(\epsilon_{F})] \\ sc[N_{2\uparrow}(\epsilon_{F}) - N_{2\downarrow}(\epsilon_{F})] & 0 & c^{2}N_{2\downarrow}(\epsilon_{F}) + s^{2}N_{2\uparrow}(\epsilon_{F}) & 0 \\ 0 & sc[N_{2\uparrow}(\epsilon_{F}) - N_{2\downarrow}(\epsilon_{F})] & 0 & c^{2}N_{2\downarrow}(\epsilon_{F}) + s^{2}N_{2\downarrow}(\epsilon_{F}) \end{pmatrix} \\ & \times \begin{pmatrix} t_{2} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -t_{2}^{*} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & t_{2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -t_{2}^{*} \end{pmatrix} \end{split}$$

e efetuando os produtos, tem-se que,

$$\begin{split} & \Sigma_2^{r/a}(\omega) = \mp i\pi |t_2|^2 \\ & \begin{pmatrix} c^2 N_{2\uparrow}(\epsilon_F) + s^2 N_{2\downarrow}(\epsilon_F) & 0 & sc[N_{2\uparrow}(\epsilon_F) - N_{2\downarrow}(\epsilon_F)] & 0 \\ 0 & c^2 N_{2\downarrow}(\epsilon_F) + s^2 N_{2\uparrow}(\epsilon_F) & 0 & sc[N_{2\uparrow}(\epsilon_F) - N_{2\downarrow}(\epsilon_F)] \\ sc[N_{2\uparrow}(\epsilon_F) - N_{2\downarrow}(\epsilon_F)] & 0 & c^2 N_{2\downarrow}(\epsilon_F) + s^2 N_{2\uparrow}(\epsilon_F) & 0 \\ 0 & sc[N_{2\uparrow}(\epsilon_F) - N_{2\downarrow}(\epsilon_F)] & 0 & c^2 N_{2\downarrow}(\epsilon_F) + s^2 N_{2\downarrow}(\epsilon_F) \end{pmatrix} \end{split}$$

A exemplo do supercondutor é definida a constante de acoplamento, a qual neste caso depende do spin, i.e.,

$$\Gamma_{2\sigma} = 2\pi |t_2|^2 N_{2\sigma}(\epsilon_F) \tag{B.2.7}$$

Substituindo esta definição, segue que,

$$\boldsymbol{\Sigma}_{2}^{r/a}(\omega) = \mp \frac{i}{2} \begin{pmatrix} c^{2}\Gamma_{2\uparrow} + s^{2}\Gamma_{2\downarrow} & 0 & sc[\Gamma_{2\uparrow} - \Gamma_{2\downarrow}] & 0 \\ 0 & c^{2}\Gamma_{2\downarrow} + s^{2}\Gamma_{2\uparrow} & 0 & sc[\Gamma_{2\uparrow} - \Gamma_{2\downarrow}] \\ sc[\Gamma_{2\uparrow} - \Gamma_{2\downarrow}] & 0 & c^{2}\Gamma_{2\downarrow} + s^{2}\Gamma_{2\uparrow} & 0 \\ 0 & sc[\Gamma_{2\uparrow} - \Gamma_{2\downarrow}] & 0 & c^{2}\Gamma_{2\uparrow} + s^{2}\Gamma_{2\downarrow} \end{pmatrix}.$$
(B.2.8)

A auto-energia do ferromagneto 1, o qual apresenta magnetização paralela ao eixo \hat{z} , pode ser determinada a partir de (B.4.4) fazendo-se $\theta = 0$ e trocando-se os índices 2 por 1, de modo que,

$$\Sigma_{1}^{r/a}(\omega) = \mp \frac{i}{2} \begin{pmatrix} \Gamma_{1\uparrow} & 0 & 0 & 0\\ 0 & \Gamma_{1\downarrow} & 0 & 0\\ 0 & 0 & \Gamma_{1\downarrow} & 0\\ 0 & 0 & 0 & \Gamma_{1\uparrow} \end{pmatrix}.$$
 (B.2.9)

Constantes de acoplamento

A polarização dos ferromagnetos é definida em termos das constantes de acoplamento da seguinte forma,

$$P_{i} = \frac{\Gamma_{i\uparrow} - \Gamma_{i\downarrow}}{\Gamma_{i\uparrow} + \Gamma_{i\downarrow}}, \qquad i = 1, 2.$$
(B.2.10)

e definindo o acoplamento médio de spin,

$$\Gamma_i = \frac{\Gamma_{i\uparrow} + \Gamma_{i\downarrow}}{2}, \qquad i = 1, 2.$$
(B.2.11)

pode-se reescrever as constantes de acoplamento por spin da seguinte forma,

$$\Gamma_{i\uparrow} = \Gamma_i (1+P_i), \qquad i = 1, 2.$$
 (B.2.12)

$$\Gamma_{i\downarrow} = \Gamma_i (1 - P_i), \qquad i = 1, 2. \tag{B.2.13}$$

As constantes definidas pelas equações (B.2.12) e (B.2.13) serão utilizadas neste trabalho, especificando-se o acoplamento médio e a polarização dos ferromagnetos.

B.3 Teorema de flutuação-dissipação

Para efetuar o cálculo da auto-energia de correlação $\Sigma^{<}$, é necessário considerar a relação entre a função de Green $G^{<}$ e a chamada função espectral A a qual é definida por,

$$A = i[G^r - G^a] = i[G^> - G^<].$$
(B.3.1)

Assumindo que os auto-estados do Hamiltoniano dos eletrodos são conhecidos, e os eletrodos estão em equilíbrio grand-canônico com um reservatório com potencial químico μ e temperatura T pode ser mostrado [80,81] que $G^{<}$ e $G^{>}$ estão relacionados por,

$$G^{>}(\omega) = -e^{\beta(\omega-\mu)}G^{<}(\omega) \tag{B.3.2}$$

Da definição da função espectral (B.3.1) pode-se escrever (B.3.2) da seguinte forma,

$$G^{<}(\omega) = if(\omega)A(\omega) \tag{B.3.3}$$

onde $f(\omega)$ é a função de Fermi-Dirac.

A equação (B.3.3) mostra que a função de Green $G^{<}$ contém informação sobre a ocupação dos estados. Além disso, desde que a função espectral está relacionada com a parte imaginária da função de Green retardada ($G^r = [G^a]^*$), então $A(\omega)$ está relacionada com a dissipação do sistema no sentido que a função espectral contém informação sobre como uma partícula em um dado estado será espalhada para fora deste estado. Portanto, a equação (B.3.3) relaciona as flutuações no equilíbrio (representadas por $G^{<}$) com a dissipação no sistema representadas por $A(\omega)$.

No caso de interesse deste trabalho a relação (B.3.3) deve ser escrita na notação de Nambu, i.e.,

$$\mathbf{G}^{<}(\omega) = i\mathbf{F}(\omega)\mathbf{A}(\omega) \tag{B.3.4}$$

onde $\mathbf{F}(\omega)$ é a matriz Fermi contendo as funções distribuições.

B.4 Cálculo das auto-energias $\Sigma^{<}$

Aqui será usada a relação (B.3.4), obtida na seção anterior, para determinar as auto-energias de correlação para os eletrodos ferromagnéticos e supercondutor.

B.4.1 Eletrodo supercondutor

A auto-energia $\boldsymbol{\Sigma}_{R}^{<}$ é definida da seguinte forma,

$$\boldsymbol{\Sigma}_{R}^{<} = \mathbf{t}_{s}^{\dagger} \mathbf{g}_{s}^{<} \mathbf{t}_{s} \tag{B.4.1}$$

Mas usando a relação (B.3.4), pode-se escrever $\mathbf{g}_s^<$ da seguinte forma,

$$\mathbf{g}_s^{<} = \mathbf{F}_s[\mathbf{g}_s^a - \mathbf{g}_s^r]$$

onde $\mathbf{F}_s = f(\omega)\mathbf{1}$ des
de que o potencial químico é considerado nulo neste caso. Assim, des
de que $\mathbf{t}_s^{\dagger}\mathbf{F}_s = \mathbf{F}_s \mathbf{t}_s^{\dagger}$, pode-se escrever ainda,

$$\mathbf{\Sigma}_R^< = \mathbf{F}_s[\mathbf{t}_s^\dagger \mathbf{g}_s^a \mathbf{t}_s - \mathbf{t}_s^\dagger \mathbf{g}_s^r \mathbf{t}_s] = \mathbf{F}_s[\mathbf{\Sigma}_R^a - \mathbf{\Sigma}_R^r]$$

Substituindo as auto-energias $\pmb{\Sigma}_R^a$
e $\pmb{\Sigma}_R^r,$ e após alguns cálculos diretos segue que,

$$\boldsymbol{\Sigma}_{R}^{<}(\omega) = i\Gamma_{s}\widetilde{\varrho}(\omega) \begin{pmatrix} 1 & -\frac{\Delta}{\omega} & 0 & 0\\ -\frac{\Delta}{\omega} & 1 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 1 & \frac{\Delta}{\omega}\\ 0 & 0 & \frac{\Delta}{\omega} & 1 \end{pmatrix}$$

onde $\tilde{\varrho}(\omega) = \operatorname{Re} \varrho(\omega)$ é a densidade de estados BCS a qual é não nula apenas para $|\omega| > \Delta$.

B.4.2 Eletrodos ferromagnéticos

A auto-energia para o eletrodo $F_2,\,\boldsymbol{\Sigma}_2^<$ é definida da seguinte forma,

$$\boldsymbol{\Sigma}_2^< = \mathbf{t}_2^\dagger \mathbf{g}_2^< \mathbf{t}_2 \tag{B.4.2}$$

E usando a relação (B.3.4) tem-se que,

$$\mathbf{g}_{2}^{<}(\omega) = \mathbf{F}_{2}(\omega)[\mathbf{g}_{2}^{a}(\omega) - \mathbf{g}_{2}^{r}(\omega)]$$
(B.4.3)

onde $\mathbf{F}(\omega)$ é a matriz Fermi para o eletrodo F_2 dada por,

$$\mathbf{F}_{2}(\omega) = \begin{pmatrix} f_{2} & 0 & 0 & 0\\ 0 & \bar{f}_{2} & 0 & 0\\ 0 & 0 & f_{2} & 0\\ 0 & 0 & 0 & \bar{f}_{2} \end{pmatrix}$$

com $f_2 = f(\omega - eV_2)$ e $\bar{f}_2 = f(\omega + eV_2)$.

Substituindo (B.4.3) em (B.4.2), tem-se que,

$$\mathbf{\Sigma}_2^< = \mathbf{F}_2(\omega) [\mathbf{t}_2^\dagger \mathbf{g}_2^a(\omega) \mathbf{t}_2 - \mathbf{t}_2^\dagger \mathbf{g}_2^r(\omega) \mathbf{t}_2]$$

onde foi usado a comutação do produto de matrizes $\mathbf{F}_2(\omega)\mathbf{t}_2^{\dagger} = \mathbf{t}_2^{\dagger}\mathbf{F}_2(\omega)$ que também é verificado neste caso. Efetuando-se os produtos matriciais tem-se finalmente que,

$$\boldsymbol{\Sigma}_{2}^{<}(\omega) = i \begin{pmatrix} (c^{2}\Gamma_{2\uparrow} + s^{2}\Gamma_{2\downarrow})f_{2} & 0 & sc(\Gamma_{2\uparrow} - \Gamma_{2\downarrow})f_{2} & 0 \\ 0 & (s^{2}\Gamma_{2\uparrow} + c^{2}\Gamma_{2\downarrow})\bar{f}_{2} & 0 & sc(\Gamma_{2\uparrow} - \Gamma_{2\downarrow})\bar{f}_{2} \\ sc(\Gamma_{2\uparrow} - \Gamma_{2\downarrow})f_{2} & 0 & (s^{2}\Gamma_{2\uparrow} + c^{2}\Gamma_{2\downarrow})f_{2} & 0 \\ 0 & sc(\Gamma_{2\uparrow} - \Gamma_{2\downarrow})\bar{f}_{2} & 0 & (c^{2}\Gamma_{2\uparrow} + s^{2}\Gamma_{2\downarrow})\bar{f}_{2} \end{pmatrix}$$
(B.4.4)

No caso do ferromagneto F_1 que apresenta magnetização paralela ao eixo \hat{z} pode-se escrever a auto-energia diretamente a partir de Σ_2^{\leq} :

$$\Sigma_{1}^{<}(\omega) = i \begin{pmatrix} f_{1}\Gamma_{1\uparrow} & 0 & 0 & 0\\ 0 & \bar{f}_{1}\Gamma_{1\downarrow} & 0 & 0\\ 0 & 0 & f_{1}\Gamma_{1\downarrow} & 0\\ 0 & 0 & 0 & \bar{f}_{1}\Gamma_{1\uparrow} \end{pmatrix}$$
(B.4.5)

Estas são as auto-energias que foram definidas no cálculo da corrente elétrica através do sistema $(F_1,F_2) - QD_a - QD_b - S.$
C

Relações Auxiliares

Neste apêndice são obtidas algumas identidades que foram utilizadas no cálculo das auto-energias e funções de Green do apêndice B.

C.1 Cálculo da transformada de Fourier de $\vartheta(T)(\cos E_kT + A \sin E_kT)$

Primeiramente será tomada a transformada de Fourier da seguinte função,

$$F(T) = \vartheta(T)(\cos E_k T + A \sin E_k T)$$

onde $\vartheta(T)$ é a função de Heaviside. Assim, $G(\omega)$ pode ser escrita na seguinte forma,

$$G(\omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i\omega T} \vartheta(T) (\cos E_k T + A \sin E_k T) \, dT$$
$$\int_{0}^{+\infty} e^{i\omega T} \cos E_k T \, dT = \frac{1}{2} \int_{0}^{+\infty} e^{i\omega T} (e^{iET} + e^{-iET}) \, dT = \frac{1}{2} \int_{0}^{+\infty} (e^{i(\omega + E_k)T} + e^{i(\omega - E_k)T}) \, dT$$
(C.1.1)

Aqui e no que segue serão úteis os seguintes resultados:

$$\int_0^{\pm\infty} e^{i(x\pm\alpha)T} dT = \frac{i}{x\pm\alpha\pm i\eta}$$
$$\int_0^{\pm\infty} e^{-i(x\pm\alpha)T} dT = -\frac{i}{x\pm\alpha\mp i\eta}$$

o que permite escrever (C.1.1) da seguinte maneira:

$$\int_0^{+\infty} e^{i\omega T} \cos E_k T \ dT = = \frac{i}{2} \left(\frac{1}{\omega + E_k + i\eta} + \frac{1}{\omega - E_k + i\eta} \right)$$

e agrupando os termos tem-se ainda,

$$\int_0^{+\infty} e^{i\omega T} \cos E_k T \, dT = = \frac{i}{2} \left(\frac{\omega + E_k + i\eta + \omega - E_k + i\eta}{(\omega + E_k + i\eta)(\omega - E_k + i\eta)} \right)$$

portanto,

$$\int_0^{+\infty} e^{i\omega T} \cos E_k T \ dT = = i \frac{\omega}{(\omega + E_k + i\eta)(\omega - E_k + i\eta)}$$

onde foi desconsiderado o termo envolvendo η no numerador desde que é um fator de convergência que deve tender a zero no final dos cálculos e portanto não contribui para o resultado da integraão.

Considerando a segunda integral, segue que:

$$\int_{0}^{+\infty} e^{i\omega T} \sin E_k T \, dT = \frac{1}{2i} \int_{0}^{+\infty} (e^{i(\omega + E_k)T} - e^{i(\omega - E_k)T}) \, dT$$

portanto,

$$\int_0^{+\infty} e^{i\omega T} \operatorname{sen} E_k T \, dT = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{\omega + E_k + i\eta} - \frac{1}{\omega - E_k + i\eta} \right)$$

e finalmente,

$$\int_0^{+\infty} e^{i\omega T} A \operatorname{sen} E_k T \, dT = -\frac{AE_k}{(\omega + E_k + i\eta)(\omega - E_k + i\eta)}$$

e assim,

$$G(\omega) = \frac{i\omega - AE_k}{(\omega + E_k + i\eta)(\omega - E_k + i\eta)}$$

agora de acordo com o texto a constante $A = \mp \frac{i\epsilon_k}{E_k}$ assim,

$$G(\omega) = i \frac{\omega \pm \epsilon_k}{(\omega + E_k + i\eta)(\omega - E_k + i\eta)}.$$
 (C.1.2)

Através de (C.1.2) pode-se escrever $F(T) = \vartheta(T)(\cos E_k T + A \sin E_k T)$ da seguinte forma,

$$\vartheta(T)(\cos E_k T \mp \frac{i\epsilon_k}{E_k} \operatorname{sen} E_k T) = i \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-i\omega T} \frac{\omega \pm \epsilon_k}{(\omega + E_k + i\eta)(\omega - E_k + i\eta)} \frac{d\omega}{2\pi}.$$
 (C.1.3)

C.2 Cálculo da transformada de Fourier de $\vartheta(-T)(\cos E_kT + A \sin E_kT)$

Agora será considerado o cálculo da transformada de Fourier da seguinte função:

$$F_2(T) = \vartheta(-T)(\cos E_k T + A \sin E_k T)$$

ou seja,

$$G_2(\omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i\omega T'} \vartheta(-T') (\cos E_k T' + A \sin E_k T') \ dT'$$

e novamente a função de Heaviside limita a integração à apenas uma região do eixo temporal assim,

$$G_2(\omega) = \int_{-\infty}^0 e^{i\omega T'} (\cos E_k T' + A \sin E_k T') dT'$$

Aqui será feita a troca de variáveis, T' = -T assim tem-se que,

$$G_2(\omega) = -\int_{\infty}^0 e^{-i\omega T} (\cos E_k T - A \sin E_k T') dT = \int_0^\infty e^{-i\omega T} (\cos E_k T - A \sin E_k T') dT$$

e considerando que,

$$\int_0^\infty e^{-i\omega T} \cos E_k T \, dT = \frac{1}{2} \int_0^\infty (e^{-i(\omega - E_k)T} + e^{-i(\omega + E_k)T}) \, dT$$
$$= -\frac{i}{2} \left(\frac{1}{\omega - E_k - i\eta} + \frac{1}{\omega + E_k - i\eta} \right)$$

ou ainda,

$$\int_0^\infty e^{-i\omega T} \cos E_k T \, dT = -i \frac{\omega}{(\omega + E_k - i\eta)(\omega - E_k - i\eta)}$$

A integral sobre o seno é dada por,

$$\int_0^\infty e^{-i\omega T} \operatorname{sen} E_k T \, dT = \frac{1}{2i} \int_0^\infty (e^{-i(\omega - E_k)T} - e^{-i(\omega + E_k)T}) \, dT$$
$$= -\frac{i}{2i} \left(\frac{1}{\omega - E_k - i\eta} - \frac{1}{\omega + E_k - i\eta} \right)$$

portanto,

$$\int_0^\infty e^{-i\omega T} \operatorname{sen} E_k T \, dT = -\frac{E_k}{(\omega + E_k - i\eta)(\omega - E_k - i\eta)}$$

Com isso G_2 pode ser escrita na seguinte forma,

$$G_2(\omega) = -i\frac{\omega}{(\omega + E_k - i\eta)(\omega - E_k - i\eta)} + \frac{AE_k}{(\omega + E_k - i\eta)(\omega - E_k - i\eta)}$$
$$G_2(\omega) = -i\frac{\omega}{(\omega + E_k - i\eta)(\omega - E_k - i\eta)} \mp \frac{i\epsilon_k}{E_k}\frac{E_k}{(\omega + E_k - i\eta)(\omega - E_k - i\eta)}$$

donde,

$$G_2(\omega) = -i \frac{\omega \pm \epsilon_k}{(\omega + E_k - i\eta)(\omega - E_k - i\eta)}$$
(C.2.1)

Através de (C.2.1) pode-se escrever a segunda identidade da seguinte forma:

$$\vartheta(-T)(\cos E_k T \mp \frac{i\epsilon_k}{E_k} \sin E_k T) = -i \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-i\omega T} \frac{\omega \pm \epsilon_k}{(\omega + E_k - i\eta)(\omega - E_k - i\eta)} \frac{d\omega}{2\pi}.$$
 (C.2.2)

C.3 Cálculo da transformada de Fourier de $\vartheta(T)B \operatorname{sen} E_kT$

Agora será considerada a seguinte função,

$$F_3(T) = \vartheta(T)B \operatorname{sen} E_k T$$

onde $B = \pm i \frac{\Delta}{E_k}$ é uma constante independente de *T*. Para determinar a transformada de Fourier de $F_3(T)$ é necessário avaliar a seguinte integral,

$$G_3(\omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} dT e^{i\omega T} F_3(T) = \int_{-\infty}^{+\infty} dT e^{i\omega T} \vartheta(T) B \operatorname{sen} E_k T = \int_0^{+\infty} dT e^{i\omega T} B \operatorname{sen} E_k T$$

e usando os resultados prévios,

$$G_3(\omega) = -\frac{BE_k}{(\omega + E_k + i\eta)(\omega - E_k + i\eta)} = \pm i\frac{\Delta}{E_k}\left(-\frac{E_k}{(\omega + E_k + i\eta)(\omega - E_k + i\eta)}\right)$$

portanto,

$$G_3(\omega) = \pm i \frac{\Delta}{(\omega + E_k + i\eta)(\omega - E_k + i\eta)}$$
(C.3.1)

Considerando a equação (C.3.1), a terceira identidade pode ser escrita da seguinte forma,

$$\mp i\vartheta(T)\frac{\Delta}{E_k}\operatorname{sen} E_kT = \pm i \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-i\omega T} \frac{\Delta}{(\omega + E_k + i\eta)(\omega - E_k + i\eta)} \frac{d\omega}{2\pi}.$$
 (C.3.2)

C.4 Cálculo da transformada de Fourier de $\vartheta(-T)B \operatorname{sen} E_kT$

Finalmente, a última identidade a ser considerada é oriunda da seguinte função,

$$F_4(T) = \vartheta(-T)B \operatorname{sen} E_k T$$

onde $B = \pm i \frac{\Delta}{E_k}$ é uma constante independente de *T*. Para determinar a transformada de Fourier de $F_4(T)$ é necessário avaliar a seguinte integral,

$$G_4(\omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} dT e^{i\omega T} F_4(T) = \int_{-\infty}^{+\infty} dT e^{i\omega T} \vartheta(-T) B \operatorname{sen} E_k T = \int_{-\infty}^0 dT e^{i\omega T} B \operatorname{sen} E_k T$$
$$G_4(\omega) = -B \int_0^{+\infty} dT e^{-i\omega T} \operatorname{sen} E_k T$$

e usando os resultados prévios pode-se escrever,

$$G_4(\omega) = -B\left(-\frac{E_k}{(\omega + E_k - i\eta)(\omega - E_k - i\eta)}\right) = \mp i\frac{\Delta}{E_k}\frac{E_k}{(\omega + E_k - i\eta)(\omega - E_k - i\eta)}$$

portanto,

$$G_4(\omega) = \mp i \frac{\Delta}{(\omega + E_k - i\eta)(\omega - E_k - i\eta)}$$

Com $G_4(\omega)$ determinado, é possível escrever a seguinte identidade,

$$\mp i \frac{\Delta}{E_k} \vartheta(-T) \operatorname{sen} E_k T = \mp i \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-i\omega T} \frac{\Delta}{(\omega + E_k - i\eta)(\omega - E_k - i\eta)} \frac{d\omega}{2\pi}.$$
 (C.4.1)

C.5 Análise da integral $\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\epsilon_k}{(\omega + E_k \pm i\eta)(\omega - E_k \pm i\eta)}$

As relações (C.1.3), (C.2.2), (C.3.2) e (C.4.1) estão escritas em termos da integral em ϵ_k . Esta integral pode ser resolvida exatamente através do Teorema dos Resíduos. A seguir serão consideradas as soluções de $\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\epsilon_k}{(\omega + E_k \pm i\eta)(\omega - E_k \pm i\eta)}$ nos intervalos $|\omega| > \Delta$ e $|\omega| > \Delta$. C.5.1 Cálculo de $\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\epsilon_k}{(\omega + E_k \pm i\eta)(\omega - E_k \pm i\eta)}$ para $\omega > \Delta$

As integrais (C.1.3) a (C.4.1) devem ser determinadas quando a soma é realizada sobre a energia. Todas as integrais que devem ser determinadas apresentam a seguinte forma geral:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\epsilon_k}{(\omega + E_k \pm i\eta)(\omega - E_k \pm i\eta)}.$$

o denominador pode reescrito da seguinte forma,

$$(\omega + E_k \pm i\eta)(\omega - E_k \pm i\eta) = \omega^2 - E_k^2 \pm i\eta[\omega + E_k + \omega - E_k] - \eta^2$$
$$= -[\epsilon_k^2 - (\omega^2 - \Delta^2) \mp 2i\omega\eta]$$

Para simplificar a análise da integral será considerado o caso $\eta < 0$. Os resultados para $\eta > 0$ seguem diretamente do cálculo para $\eta < 0$.

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\epsilon_k}{(\omega + E_k - i\eta)(\omega - E_k - i\eta)} = \begin{cases} -\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\epsilon_k}{(\epsilon_k - z_1)(\epsilon_k - z_2)}, & \omega < 0\\ -\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\epsilon_k}{(\epsilon_k - z_3)(\epsilon_k - z_4)}, & \omega > 0 \end{cases}$$

Os pólos do integrando dependem do sinal da energia. Para $\omega < 0$ os pólos são dados por: $z_1 = \sqrt{\omega^2 - \Delta^2} (\cos \theta + i \sin \theta)$ e $z_2 = \sqrt{\omega^2 - \Delta^2} (-\cos \theta - i \sin \theta)$. Para $\omega > 0$ os pólos são localizados nos pontos $z_3 = \sqrt{\omega^2 - \Delta^2} (-\cos \theta + i \sin \theta)$ e $z_4 = \sqrt{\omega^2 - \Delta^2} (\cos \theta - i \sin \theta)$. O ângulo θ é definido por,

$$\theta = \frac{1}{2} \arctan\left(\pm \frac{2\omega\eta}{\omega^2 - \Delta^2}\right) \tag{C.5.1}$$

C.5 Análise da integral
$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\epsilon_k}{(\omega + E_k \pm i\eta)(\omega - E_k \pm i\eta)}$$

Os pólos para o caso $\eta > 0$ podem ser obtidos fazendo-se $\theta \to -\theta$ na equação (C.5.1). Fechandose o contorno no semi-plano superior conforme mostrado na figura C.1 as integrais para ambos os casos podem ser obtidas calculando-se os resíduos em $z = z_1$ e $z = z_3$, assim segue que,

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\epsilon_k}{(\omega + E_k - i\eta)(\omega - E_k - i\eta)} = \begin{cases} -\frac{2\pi i}{2z_1}, & \omega < 0\\ -\frac{2\pi i}{2z_3}, & \omega > 0 \end{cases}$$

Substituindo-se os valores dos pólos e tomando o limite de $\eta \rightarrow 0$ pode-se escrever,



Figura C.1: Contornos de integração utilizados no cálculo da integral para o caso $\omega > \Delta$.

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\epsilon_k}{(\omega + E_k - i\eta)(\omega - E_k - i\eta)} = \begin{cases} -\frac{\pi i}{\sqrt{\omega^2 - \Delta^2}}, & \omega < 0\\ \\ \frac{\pi i}{\sqrt{\omega^2 - \Delta^2}}, & \omega > 0 \end{cases}$$

As duas integrais podem ser reunidas na seguinte forma,

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\epsilon_k}{(\omega + E_k - i\eta)(\omega - E_k - i\eta)} = \frac{|\omega|}{\omega} \frac{\pi i}{\sqrt{\omega^2 - \Delta^2}}.$$

A integral para $\eta < 0$ pode ser obtida tomando o complexo conjugado de ambos os lados e assim pode-se escrever finalmente,

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\epsilon_k}{(\omega + E_k \pm i\eta)(\omega - E_k \pm i\eta)} = \mp \frac{|\omega|}{\omega} \frac{\pi i}{\sqrt{\omega^2 - \Delta^2}}, \qquad \omega \ge 0.$$
(C.5.2)

C.5.2 Cálculo de
$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\epsilon_k}{(\omega + E_k \pm i\eta)(\omega - E_k \pm i\eta)}$$
 para $\omega < \Delta$

Fazendo $\omega < \Delta$ nas equações anteriores segue diretamente que,

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\epsilon_k}{(\omega + E_k - i\eta)(\omega - E_k - i\eta)} = -\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\epsilon_k}{(\epsilon_k - w_1)(\epsilon_k - w_2)}, \qquad \omega \gtrless 0$$

onde os pólos são dados por, $w_1 = i\sqrt{\Delta^2 - \omega^2}$ e $w_2 = -i\sqrt{\Delta^2 - \omega^2}$.



Figura C.2: Contornos de integração utilizados no cálculo da integral para o caso $\omega < \Delta$.

E usando o teorema dos resíduos para o contorno definido na figura C.2 tem-se finalmente,

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\epsilon_k}{(\omega + E_k - i\eta)(\omega - E_k - i\eta)} = -\frac{2\pi i}{(w_1 - w_2)} = -\frac{\pi}{\sqrt{\Delta^2 - \omega^2}}, \qquad \omega \gtrless 0$$

Desde que o argumento infinitesimal, não utilizado neste caso, o resultado é válido para $+i\eta$ assim, tem-se finalmente,

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\epsilon_k}{(\omega + E_k \pm i\eta)(\omega - E_k \pm i\eta)} = -\frac{\pi}{\sqrt{\Delta^2 - \omega^2}}, \qquad \omega \ge 0$$
(C.5.3)

As duas integrais podem (C.5.2) e (C.5.5) podem ser combinadas em apenas uma da seguinte forma:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\epsilon_k}{(\omega + E_k \pm i\eta)(\omega - E_k \pm i\eta)} = \frac{\mp i\pi}{\omega} \left(\frac{|\omega|\vartheta(|\omega| - \Delta)}{\sqrt{\omega^2 - \Delta^2}} \mp \frac{i\omega\vartheta(\Delta - |\omega|)}{\sqrt{\Delta^2 - \omega^2}} \right).$$

Aqui é conveniente definir a densidade de estados generalizada,

$$\varrho(\omega) = \frac{|\omega|\vartheta(|\omega| - \Delta)}{\sqrt{\omega^2 - \Delta^2}} - \frac{i\omega\vartheta(\Delta - |\omega|)}{\sqrt{\Delta^2 - \omega^2}}$$
(C.5.4)

e as integrais podem ser escritas na forma final,

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\epsilon_k}{(\omega + E_k + i\eta)(\omega - E_k + i\eta)} = -\frac{i\pi}{\omega} \varrho(\omega)$$
(C.5.5)
$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\epsilon_k}{(\omega - E_k - i\eta)(\omega - E_k - i\eta)} = \frac{i\pi}{\omega} [\rho(\omega)]^*.$$
(C.5.6)

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\epsilon_k}{(\omega + E_k - i\eta)(\omega - E_k - i\eta)} = \frac{i\pi}{\omega} [\varrho(\omega)]^*.$$
 (C.5.6)

Integral das identidades C.5.3

Substituindo os resultados (C.5.5) e (C.5.6) nas relações (C.1.3), (C.2.2), (C.3.2) e (C.4.1) podese reescrever estas equações da seguinte forma:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} d\epsilon_k \vartheta(T)(\cos E_k T \mp \frac{i\epsilon_k}{E_k} \operatorname{sen} E_k T) = \frac{1}{2} \int d\omega \ e^{-i\omega T} \varrho(\omega)$$
$$\int_{-\infty}^{+\infty} d\epsilon_k \vartheta(-T)(\cos E_k T \mp \frac{i\epsilon_k}{E_k} \operatorname{sen} E_k T) = \frac{1}{2} \int d\omega \ e^{-i\omega T} [\varrho(\omega)]^*$$
$$\mp i \int_{-\infty}^{+\infty} d\epsilon_k \vartheta(T) \frac{\Delta}{E_k} \operatorname{sen} E_k T = \pm \frac{1}{2} \int d\omega \ e^{-i\omega T} \frac{\Delta}{\omega} \varrho(\omega)$$
$$\mp i \int_{-\infty}^{+\infty} d\epsilon_k \frac{\Delta}{E_k} \vartheta(-T) \operatorname{sen} E_k T = \pm \frac{1}{2} \int d\omega \ e^{-i\omega T} \frac{\Delta}{\omega} [\varrho(\omega)]^*$$

e usando a notação do apêndice B tem-se ainda,

$$\int_{-\infty}^{+\infty} d\epsilon_k \vartheta(T) F_1^{\mp}(\epsilon_k) = \frac{1}{2} \int d\omega \ e^{-i\omega T} \varrho(\omega)$$
$$\int_{-\infty}^{+\infty} d\epsilon_k \vartheta(-T) F_1^{\mp}(\epsilon_k) = \frac{1}{2} \int d\omega \ e^{-i\omega T} [\varrho(\omega)]^*$$
$$\mp \int_{-\infty}^{+\infty} d\epsilon_k \vartheta(T) F_3^{+}(\epsilon_k) = \pm \frac{1}{2} \int d\omega \ e^{-i\omega T} \frac{\Delta}{\omega} \varrho(\omega)$$
$$\mp \int_{-\infty}^{+\infty} d\epsilon_k \vartheta(-T) F_3^{+}(\epsilon_k) = \pm \frac{1}{2} \int d\omega \ e^{-i\omega T} \frac{\Delta}{\omega} [\varrho(\omega)]^*$$

Cálculo da função de Green $\mathbf{G}_{\alpha\beta}^{<}(\omega)$

Neste apêndice é derivada uma equação genérica para as funções de Green de correlação mista envolvendo operadores dos eletrodos e dos pontos quânticos. Estas funções são as matrizes $\mathbf{G}_{a1}^{<}(\omega)$, $\mathbf{G}_{a2}^{<}(\omega)$ e $\mathbf{G}_{as}^{<}(\omega)$ para o ponto quântico a. Funções de Green similares são definidas para o ponto quântico b. Será considerada uma função de Green genérica $\mathbf{G}_{\alpha\beta}^{<}$ que pode ser particularizada para os casos que aparecem na derivação da funções $\mathbf{G}_{aa}^{<}$ e $\mathbf{G}_{bb}^{<}$.

D.1 Cálculo de $G^{<}_{\alpha\beta}$

A função de Green $\mathbf{G}_{\alpha\beta}^{<}$ é determinada pelo procedimento de continuação analítica da função de Green ordenada no contorno C, $\mathbf{G}_{\alpha\beta}^{t}$ definida abaixo:

$$\mathbf{G}_{\alpha\beta}^{t}(\tau,\tau') = -i\sum_{k} \langle \mathcal{T}_{C}[\hat{S}_{C}\widetilde{\boldsymbol{\Psi}}_{\alpha}(\tau)\otimes\widetilde{\boldsymbol{\Phi}}_{\beta k}^{\dagger}(\tau')\rangle \tag{D.1.1}$$

onde, $\hat{S}_C = \exp\left\{-i\int_C d\tau_1 \tilde{H}_T(\tau_1)\right\}$ é o operador definido no capítulo 1. Os índices $\alpha \in \beta$, correspondem aos pontos quânticos e aos eletrodos, respectivamente. O símbolo "~" indica que os operadores estão expressos na versão de interação.

O operador \hat{S}_C é dado por,

$$\hat{S}_C = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-i)^n}{n!} \int_C d\tau_1 \int_C d\tau_2 \dots \int_C d\tau_n [\widetilde{H}_T(\tau_1) \widetilde{H}_T(\tau_2) \dots \widetilde{H}_T(\tau_n)]$$

onde,

$$\hat{H}_T(\tau_n) = \sum_{k_n} [\hat{\Phi}^{\dagger}_{\beta k_n}(\tau_n) \hat{\mathbf{t}}_{\beta} \hat{\Psi}_{\gamma}(\tau_n) + \hat{\Psi}^{\dagger}_{\gamma}(\tau_n) \hat{\mathbf{t}}^{\dagger}_{\beta} \hat{\Phi}_{\beta k_n}(\tau_n)]$$

O ponto crucial na simplificação da função de Green (D.1.1) é que na representação de interação, o acoplamento entre os operadores $\hat{\Psi}_{\gamma}$ e $\hat{\Phi}_{\beta k}$ está explicitamente colocado no operador \hat{S}_C . No entanto, como este Hamiltoniano está na representação de interação, o acoplamento não está incluso no Hamiltoniano que aparece na média térmica permitindo que seja feita a fatoração entre médias de operadores do ponto quântico e médias dos operadores dos contatos. O próximo passo consiste em considerar o fato de que os contatos são não-interagentes sendo possível aplicar o Teorema de Wick para os operadores $\hat{\Phi}_{\beta k}$. Substituindo o operador \hat{S}_C na definição de $G^{<}$ segue que,

$$\begin{aligned} \mathbf{G}_{\alpha\beta k}^{t}(\tau,\tau') &= \\ &= -i\sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-i)^{n}}{n!} \left\langle \mathcal{T}_{C} \left\{ \left[\int_{C} d\tau_{1} \sum_{k_{1}} [\widetilde{\mathbf{\Phi}}_{\beta k_{1}}^{\dagger}(\tau_{1}) \widehat{\mathbf{t}}_{\beta} \widetilde{\mathbf{\Psi}}_{\gamma}(\tau_{1}) + \widetilde{\mathbf{\Psi}}_{\gamma}^{\dagger}(\tau_{1}) \widehat{\mathbf{t}}_{\beta}^{\dagger} \widetilde{\mathbf{\Phi}}_{\beta k_{1}}(\tau_{1})] \times \right. \\ & \times \int_{C} d\tau_{2} \sum_{k_{2}} [\widetilde{\mathbf{\Phi}}_{\beta k_{2}}^{\dagger}(\tau_{2}) \widehat{\mathbf{t}}_{\beta} \widetilde{\mathbf{\Psi}}_{\gamma}(\tau_{2}) + \widetilde{\mathbf{\Psi}}_{\gamma}^{\dagger}(\tau_{2}) \widehat{\mathbf{t}}_{\beta}^{\dagger} \widetilde{\mathbf{\Phi}}_{\beta k_{2}}(\tau_{2})] \times \dots \\ & \dots \times \int_{C} d\tau_{n} \sum_{k_{n}} [\widetilde{\mathbf{\Phi}}_{\beta k_{n}}^{\dagger}(\tau_{n}) \widehat{\mathbf{t}}_{\beta} \widetilde{\mathbf{\Psi}}_{\gamma}(\tau_{n}) + \widetilde{\mathbf{\Psi}}_{\gamma}^{\dagger}(\tau_{n}) \widehat{\mathbf{t}}_{\beta}^{\dagger} \widetilde{\mathbf{\Phi}}_{\beta k_{n}}(\tau_{n})] \right] \widetilde{\mathbf{\Psi}}_{\alpha}(\tau) \otimes \widetilde{\mathbf{\Phi}}_{\beta k}^{\dagger}(\tau') \bigg\} \right\rangle. \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \mathbf{G}_{\alpha\beta k}^{t}(\tau,\tau') &= -i\sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-i)^{n}}{n!} \left[\sum_{k_{1}} \int_{C} d\tau_{1} [\langle \mathcal{T}_{C} \{ \int_{C} d\tau_{2} \sum_{k_{2}} [\tilde{\boldsymbol{\Psi}}_{\gamma}^{\dagger}(\tau_{2}) \hat{\mathbf{t}}_{\beta}^{\dagger} \tilde{\boldsymbol{\Phi}}_{\beta k_{2}}(\tau_{2}) + \mathrm{H.c.}] \times \\ & \ldots \times \int_{C} d\tau_{n} \sum_{k_{n}} [\tilde{\boldsymbol{\Psi}}_{\gamma}^{\dagger}(\tau_{n}) \hat{\mathbf{t}}_{\beta}^{\dagger} \tilde{\boldsymbol{\Phi}}_{\beta k_{n}}(\tau_{n}) + \mathrm{H.c.}] \tilde{\boldsymbol{\Psi}}_{\alpha}(\tau) \otimes \tilde{\boldsymbol{\Psi}}_{\gamma}^{\dagger}(\tau_{1}) \} \rangle \hat{\mathbf{t}}_{\beta}^{\dagger} \langle \mathcal{T}_{C} \{ \tilde{\boldsymbol{\Phi}}_{\beta k_{1}}(\tau_{1}) \otimes \tilde{\boldsymbol{\Phi}}_{\beta k}^{\dagger}(\tau') \} \rangle \\ & + \sum_{k_{2}} \int_{C} d\tau_{2} [\langle \mathcal{T}_{C} \{ \int_{C} d\tau_{1} \sum_{k_{1}} [\tilde{\boldsymbol{\Psi}}_{\gamma}^{\dagger}(\tau_{1}) \hat{\mathbf{t}}_{\beta}^{\dagger} \tilde{\boldsymbol{\Phi}}_{\beta k_{1}}(\tau_{1}) + \mathrm{H.c.}] \times \\ & \ldots \times \int_{C} d\tau_{n} \sum_{k_{n}} [\tilde{\boldsymbol{\Psi}}_{\gamma}^{\dagger}(\tau_{n}) \hat{\mathbf{t}}_{\beta}^{\dagger} \tilde{\boldsymbol{\Phi}}_{\beta k_{n}}(\tau_{n}) + \mathrm{H.c.}] \tilde{\boldsymbol{\Psi}}_{\alpha}(\tau) \otimes \tilde{\boldsymbol{\Psi}}_{\gamma}^{\dagger}(\tau_{2}) \} \rangle \hat{\mathbf{t}}_{\beta}^{\dagger} \langle \mathcal{T}_{C} \{ \tilde{\boldsymbol{\Phi}}_{\beta k_{2}}(\tau_{2}) \otimes \tilde{\boldsymbol{\Phi}}_{\beta k}^{\dagger}(\tau') \} \rangle + \\ & + \ldots (n-2) \text{ termos restantes} \end{aligned}$$

Desde os índices dos operadores são mudos, os n termos entre colchetes são iguais. Assim, pode-se escrever,

$$\mathbf{G}_{\alpha\beta k}^{t}(\tau,\tau') = -i\sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-i)^{n}}{n!} n \sum_{k_{1}} \int_{C} d\tau_{1} \langle \mathcal{T}_{C} \{ \int_{C} d\tau_{2} \sum_{k_{2}} [\widetilde{\mathbf{\Psi}}_{\gamma}^{\dagger}(\tau_{2}) \widehat{\mathbf{t}}_{\beta}^{\dagger} \widetilde{\mathbf{\Phi}}_{\beta k_{2}}(\tau_{2}) + \mathrm{H.c.}] \times \\ \dots \times \int_{C} d\tau_{n} \sum_{k_{n}} [\widetilde{\mathbf{\Psi}}_{\gamma}^{\dagger}(\tau_{n}) \widehat{\mathbf{t}}_{\beta}^{\dagger} \widetilde{\mathbf{\Phi}}_{\beta k_{n}}(\tau_{n}) + \mathrm{H.c.}] \widetilde{\mathbf{\Psi}}_{\alpha}(\tau) \otimes \widetilde{\mathbf{\Psi}}_{\gamma}^{\dagger}(\tau_{1}) \} \rangle \widehat{\mathbf{t}}_{\beta}^{\dagger} \langle \mathcal{T}_{C} \{ \widetilde{\mathbf{\Phi}}_{\beta k_{1}}(\tau_{1}) \otimes \widetilde{\mathbf{\Phi}}_{\beta k}^{\dagger}(\tau') \} \rangle$$

o que permite fazer algumas simplificações:

$$\mathbf{G}_{\alpha\beta k}^{t}(\tau,\tau') = -i\sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-i)^{n-1}}{(n-1)!} \sum_{p} \int_{C} d\tau_{\zeta} \langle \mathcal{T}_{C} \{ \int_{C} d\tau_{1} \sum_{k_{1}} [\widetilde{\boldsymbol{\Psi}}_{\gamma}^{\dagger}(\tau_{1}) \widehat{\mathbf{t}}_{\beta}^{\dagger} \widetilde{\boldsymbol{\Phi}}_{\beta k_{1}}(\tau_{1}) + \mathrm{H.c.}] \times \\ \dots \times \int_{C} d\tau_{n-1} \sum_{k_{n-1}} [\widetilde{\boldsymbol{\Psi}}_{\gamma}^{\dagger}(\tau_{n-1}) \widehat{\mathbf{t}}_{\beta}^{\dagger} \widetilde{\boldsymbol{\Phi}}_{\beta k_{n-1}}(\tau_{n-1}) + \mathrm{H.c.}] \widetilde{\boldsymbol{\Psi}}_{\alpha}(\tau) \otimes \widetilde{\boldsymbol{\Psi}}_{\gamma}^{\dagger}(\tau_{\zeta}) \} \rangle \widehat{\mathbf{t}}_{\beta}^{\dagger}(-i) \langle \mathcal{T}_{C} \{ \widetilde{\boldsymbol{\Phi}}_{\beta p}(\tau_{\zeta}) \otimes \widetilde{\boldsymbol{\Phi}}_{\beta k}^{\dagger}(\tau') \} \rangle$$

e rearranjando os termos e fazendo a troca de índices $n \to n+1$ tem-se que,

$$\mathbf{G}_{\alpha\beta k}^{t}(\tau,\tau') = -i\sum_{p}\int_{C}d\tau_{\zeta}\left\langle\mathcal{T}_{C}\left\{\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(-i)^{n}}{n!}\int_{C}d\tau_{1}\sum_{k_{1}}[\widetilde{\mathbf{\Psi}}_{\gamma}^{\dagger}(\tau_{1})\widehat{\mathbf{t}}_{\beta}^{\dagger}\widetilde{\mathbf{\Phi}}_{\beta k_{1}}(\tau_{1}) + \mathrm{H.c.}]\times\right.\right.$$
$$\dots\times\int_{C}d\tau_{n}\sum_{k_{n}}[\widetilde{\mathbf{\Psi}}_{\gamma}^{\dagger}(\tau_{n})\widehat{\mathbf{t}}_{\beta}^{\dagger}\widetilde{\mathbf{\Phi}}_{\beta k_{n}}(\tau_{n}) + \mathrm{H.c.}]\widetilde{\mathbf{\Psi}}_{\alpha}(\tau)\otimes\widetilde{\mathbf{\Psi}}_{\gamma}^{\dagger}(\tau_{\zeta})\left.\right\}\left\langle\widehat{\mathbf{t}}_{\beta}^{\dagger}(-i)\langle\mathcal{T}_{C}\{\widetilde{\mathbf{\Phi}}_{\beta p}(\tau_{\zeta})\otimes\widetilde{\mathbf{\Phi}}_{\beta k}^{\dagger}(\tau')\}\rangle\right.$$

e fazendo a identificação,

$$\hat{S}_C = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-i)^n}{n!} \int_C d\tau_1 \sum_{k_1} [\tilde{\Psi}^{\dagger}_{\gamma}(\tau_1) \hat{\mathbf{t}}^{\dagger}_{\beta} \tilde{\Phi}_{\beta k_1}(\tau_1) + \text{H.c.}] \times \ldots \times \int_C d\tau_n \sum_{k_n} [\tilde{\Psi}^{\dagger}_{\gamma}(\tau_n) \hat{\mathbf{t}}^{\dagger}_{\beta} \tilde{\Phi}_{\beta k_n}(\tau_n) + \text{H.c.}]$$

pode-se reescrever $\mathbf{G}^t_{\alpha\beta k}(\tau,\tau')$ da seguinte forma,

$$\mathbf{G}_{\alpha\beta k}^{t}(\tau,\tau') = -i\sum_{p} \int_{C} d\tau_{\zeta} \langle \mathcal{T}_{C} \{ \hat{S}_{C} \widetilde{\boldsymbol{\Psi}}_{\alpha}(\tau) \otimes \widetilde{\boldsymbol{\Psi}}_{\gamma}^{\dagger}(\tau_{\zeta}) \} \rangle \hat{\mathbf{t}}_{\beta}^{\dagger}(-i) \langle \mathcal{T}_{C} \{ \widetilde{\boldsymbol{\Phi}}_{\beta p}(\tau_{\zeta}) \otimes \widetilde{\boldsymbol{\Phi}}_{\beta k}^{\dagger}(\tau') \} \rangle$$

ou ainda,

$$\mathbf{G}_{\alpha\beta k}^{t}(\tau,\tau') = -i\sum_{p} \int_{C} d\tau_{\zeta} \langle \mathcal{T}_{C} \{ \hat{\boldsymbol{\Psi}}_{\alpha}(\tau) \otimes \hat{\boldsymbol{\Psi}}_{\gamma}^{\dagger}(\tau_{\zeta}) \} \rangle \hat{\mathbf{t}}_{\beta}^{\dagger}(-i) \langle \mathcal{T}_{C} \{ \widetilde{\boldsymbol{\Phi}}_{\beta p}(\tau_{\zeta}) \otimes \widetilde{\boldsymbol{\Phi}}_{\beta k}^{\dagger}(\tau') \} \rangle$$
(D.1.2)

A primeira média, cujos operadores estão novamente na versão de Heisenberg, corresponde a função de Green interagente dos pontos quânticos $\alpha \in \beta$, i.e., $\mathbf{G}_{\alpha\gamma}^t(\tau, \tau_{\zeta}) = -i \langle \mathcal{T}_C \{ \hat{\Psi}_{\alpha}(\tau) \otimes \hat{\Psi}_{\gamma}^{\dagger}(\tau_{\zeta}) \} \rangle$. A segunda média, que ainda está sendo representada na versão de interação, corresponde à função de Green do eletrodo β , não-interagente. Desde que esta função de Green é diagonal no vetor de onda, então $-i \langle \mathcal{T}_C \{ \tilde{\Phi}_{\beta p}(\tau_{\zeta}) \otimes \tilde{\Phi}_{\beta k}^{\dagger}(\tau') \} \rangle = \delta_{kp} \mathbf{g}_{\beta k}^t(\tau_{\zeta}, \tau')$ e substituindo estas definições em (D.1.2), tem-se que,

$$\mathbf{G}_{\alpha\beta k}^{t}(\tau,\tau') = \int_{C} d\tau_{\zeta} \mathbf{G}_{\alpha\gamma}^{t}(\tau,\tau_{\zeta}) \hat{\mathbf{t}}_{\beta}^{\dagger} \mathbf{g}_{\beta k}^{t}(\tau_{\zeta},\tau')$$
(D.1.3)

D.1.1 Continuação Analítica da equação (D.1.3)

A integração (D.1.3) pode ser continuada analiticamente para tempos reais conforme discutido no capítulo 1. Desta forma, a equação (D.1.3) gera diversas funções de Green que serão úteis na determinação das propriedades de transporte do sistema estudado.

Função de Green de correlação $G^{<}$

Aplicando a regra dada pela equação (2.3.6) do capítulo 2, na equação (D.1.3) segue que:

$$\mathbf{G}_{\alpha\beta k}^{<}(t-t') = \int dt_{\zeta} [\mathbf{G}_{\alpha\gamma}^{r}(t-t_{\zeta}) \hat{\mathbf{t}}_{\beta}^{\dagger} \mathbf{g}_{\beta k}^{<}(t_{\zeta}-t') + \mathbf{G}_{\alpha\gamma}^{<}(t-t_{\zeta}) \hat{\mathbf{t}}_{\beta}^{\dagger} \mathbf{g}_{\beta k}^{a}(t_{\zeta}-t')]$$
(D.1.4)

e aplicando a transformada de Fourier em ambos os membros da equação acima, segue que,

$$\mathbf{G}_{\alpha\beta}^{<}(\omega) = \sum_{k} [\mathbf{G}_{\alpha\gamma}^{r}(\omega) \hat{\mathbf{t}}_{\beta}^{\dagger} \mathbf{g}_{\beta k}^{<}(\omega) + \mathbf{G}_{\alpha\gamma}^{<}(\omega) \hat{\mathbf{t}}_{\beta}^{\dagger} \mathbf{g}_{\beta k}^{a}(\omega)].$$
(D.1.5)

Função de Green de avançada/retardada $\mathbf{G}^{r/a}$

Aplicando-se a regra dada pela equação (2.3.8) do capítulo 2, a equação (D.1.3) permite escrever,

$$\mathbf{G}_{\alpha\beta k}^{r/a}(t-t') = \int dt_{\zeta} \mathbf{G}_{\alpha\gamma}^{r/a}(t-t_{\zeta}) \hat{\mathbf{t}}_{\beta}^{\dagger} \mathbf{g}_{\beta k}^{r/a}(t_{\zeta}-t')$$
(D.1.6)

e aplicando a transformada de Fourier, segue finalmente que:

$$\mathbf{G}_{\alpha\beta k}^{r/a}(\omega) = \mathbf{G}_{\alpha\gamma}^{r/a}(\omega) \hat{\mathbf{t}}_{\beta}^{\dagger} \mathbf{g}_{\beta k}^{r/a}(\omega)$$
(D.1.7)

Cálculo da corrente elétrica

Neste apêndice são dadas as demonstrações dos cálculos da corrente elétrica obtida a partir das equações (3.3.3) e (3.3.8) do capítulo 3.

E.1 Corrente I_1

A corrente ${\cal I}_1$ é dada pela equação (3.3.3) do capítulo 3

$$I_1 = \frac{e}{h} \int d\omega \left[\mathbf{G}_{aa}^r(\omega) \boldsymbol{\Sigma}_1^<(\omega) + \mathbf{G}_{aa}^<(\omega) \boldsymbol{\Sigma}_1^a(\omega) + \text{H.c.} \right]_{11+33}$$
(E.1.1)

O integrando pode ser escrito explicitamente da seguinte forma:

$$\begin{split} \mathbf{G}_{aa}^{r}(\omega) \mathbf{\Sigma}_{1}^{<}(\omega) + \mathbf{G}_{aa}^{<}(\omega) \mathbf{\Sigma}_{1}^{a}(\omega) + \mathrm{H.c.} \\ &= \mathbf{G}_{aa}^{r}(\omega) \mathbf{\Sigma}_{1}^{<}(\omega) + \mathbf{G}_{aa}^{<}(\omega) \mathbf{\Sigma}_{1}^{a}(\omega) + [\mathbf{\Sigma}_{1}^{<}(\omega)]^{\dagger} \mathbf{G}_{aa}^{a}(\omega) + \mathbf{\Sigma}_{1}^{r}(\omega) [\mathbf{G}_{aa}^{<}(\omega)]^{\dagger} \end{split}$$

As auto-energias para o ferromagneto 1, foram determinadas no apêndice B. A auto-energia $\pmb{\Sigma}_1^<(\omega)$ definida por,

$$\boldsymbol{\Sigma}_{1}^{<}(\omega) = \mathbf{F}_{1}(\omega) [\boldsymbol{\Sigma}_{1}^{a}(\omega) - \boldsymbol{\Sigma}_{1}^{r}(\omega)]$$
(E.1.2)

é escrita da seguinte forma,

$$\boldsymbol{\Sigma}_{1}^{<}(\omega) = i \begin{bmatrix} f_{1}\Gamma_{1\uparrow} & 0 & 0 & 0\\ 0 & \bar{f}_{1}\Gamma_{1\downarrow} & 0 & 0\\ 0 & 0 & f_{1}\Gamma_{1\downarrow} & 0\\ 0 & 0 & 0 & \bar{f}_{1}\Gamma_{1\uparrow} \end{bmatrix}$$
(E.1.3)

onde,

$$\boldsymbol{\Sigma}_{1}^{r,a}(\omega) = \mp \frac{i}{2} \begin{bmatrix} \Gamma_{1\uparrow} & 0 & 0 & 0\\ 0 & \Gamma_{1\downarrow} & 0 & 0\\ 0 & 0 & \Gamma_{1\downarrow} & 0\\ 0 & 0 & 0 & \Gamma_{1\uparrow} \end{bmatrix}.$$
 (E.1.4)

Fazendo-se as multiplicações matriciais necessárias, pode-se obter as componentes 11 e 33 do elétron na notação de Nambu, as quais são dadas por;

$$\begin{split} \left[\mathbf{G}_{aa}^{r}(\omega) \mathbf{\Sigma}_{1}^{<}(\omega) + \mathbf{G}_{aa}^{<}(\omega) \mathbf{\Sigma}_{1}^{a}(\omega) + \mathrm{H.c.} \right]_{11+33} &= \frac{1}{2} i \Gamma_{1\uparrow} \left(G_{aa,11}^{<} - [G_{aa,11}^{<}]^{*} \right) \\ &+ i f_{1} \Gamma_{1\uparrow} \left(G_{aa,11}^{r} - [G_{aa,11}^{r}]^{*} \right) + \frac{1}{2} i \Gamma_{1\downarrow} \left(G_{aa,33}^{<} - [G_{aa,33}^{<}]^{*} \right) + i f_{1} \Gamma_{1\downarrow} \left(G_{aa,33}^{r} - [G_{aa,33}^{r}]^{*} \right), \end{split}$$

e usando o fato de que as funções de Green avançada e retardada estão relacionadas por, $\mathbf{G}^r = [\mathbf{G}^a]^{\dagger}$, pode-se escrever ainda,

$$\begin{bmatrix} \mathbf{G}_{aa}^{r}(\omega) \mathbf{\Sigma}_{1}^{<}(\omega) + \mathbf{G}_{aa}^{<}(\omega) \mathbf{\Sigma}_{1}^{a}(\omega) + \text{H.c.} \end{bmatrix}_{11+33} = \\ = \frac{1}{2} i \Gamma_{1\uparrow} \left(G_{aa,11}^{<} - [G_{aa,11}^{<}]^{*} \right) + \frac{1}{2} i \Gamma_{1\downarrow} \left(G_{aa,33}^{<} - [G_{aa,33}^{<}]^{*} \right) + i f_{1} \Gamma_{1\uparrow} \left(G_{aa,11}^{r} - G_{aa,11}^{a} \right) \\ + i f_{1} \Gamma_{1\downarrow} \left(G_{aa,33}^{r} - G_{aa,33}^{a} \right). \quad (E.1.5)$$

Resta determinar as componentes da equação (E.1.5). Para isso primeiramente serão determinadas as componentes 11 e 33 da função de correlação $\mathbf{G}^{<}$. Conforme mostrado no capítulo 3, a função de correlação é dada pela equação de Keldysh, i.e.,

$$\mathbf{G}_{aa}^{<}(\omega) = \mathbf{G}_{aa}^{r}(\omega) \mathbf{\Sigma}_{Ta}^{<}(\omega) \mathbf{G}_{aa}^{a}(\omega)$$

e após algumas multiplicações matriciais, as componentes de interesse são dadas por,

$$\begin{split} G^{<}_{aa,11} &= [G^{r}_{aa,11}]^{*} \left(G^{r}_{aa,11} \Sigma^{<}_{Ta,11} + G^{r}_{aa,12} \Sigma^{<}_{Ta,21} + G^{r}_{aa,13} \Sigma^{<}_{Ta,31} + G^{r}_{aa,14} \Sigma^{<}_{Ta,41} \right) + \\ &+ [G^{r}_{aa,12}]^{*} \left(G^{r}_{aa,11} \Sigma^{<}_{Ta,12} + G^{r}_{aa,12} \Sigma^{<}_{Ta,22} + G^{r}_{aa,13} \Sigma^{<}_{Ta,32} + G^{r}_{aa,14} \Sigma^{<}_{Ta,42} \right) + \\ &+ [G^{r}_{aa,13}]^{*} \left(G^{r}_{aa,11} \Sigma^{<}_{Ta,13} + G^{r}_{aa,12} \Sigma^{<}_{Ta,23} + G^{r}_{aa,13} \Sigma^{<}_{Ta,33} + G^{r}_{aa,14} \Sigma^{<}_{Ta,43} \right) + \\ &+ [G^{r}_{aa,14}]^{*} \left(G^{r}_{aa,11} \Sigma^{<}_{Ta,14} + G^{r}_{aa,12} \Sigma^{<}_{Ta,24} + G^{r}_{aa,13} \Sigma^{<}_{Ta,34} + G^{r}_{aa,14} \Sigma^{<}_{Ta,44} \right) \end{split}$$

$$\begin{split} G_{aa,33}^{<} &= [G_{aa,31}^{r}]^{*} \left(G_{aa,31}^{r} \Sigma_{Ta,11}^{<} + G_{aa,32}^{r} \Sigma_{Ta,21}^{<} + G_{aa,33}^{r} \Sigma_{Ta,31}^{<} + G_{aa,34}^{r} \Sigma_{Ta,41}^{<} \right) + \\ &+ [G_{aa,32}^{r}]^{*} \left(G_{aa,31}^{r} \Sigma_{Ta,12}^{<} + G_{aa,32}^{r} \Sigma_{Ta,22}^{<} + G_{aa,33}^{r} \Sigma_{Ta,32}^{<} + G_{aa,34}^{r} \Sigma_{Ta,42}^{<} \right) + \\ &+ [G_{aa,33}^{r}]^{*} \left(G_{aa,31}^{r} \Sigma_{Ta,13}^{<} + G_{aa,32}^{r} \Sigma_{Ta,23}^{<} + G_{aa,33}^{r} \Sigma_{Ta,33}^{<} + G_{aa,34}^{r} \Sigma_{Ta,42}^{<} \right) + \\ &+ [G_{aa,33}^{r}]^{*} \left(G_{aa,31}^{r} \Sigma_{Ta,13}^{<} + G_{aa,32}^{r} \Sigma_{Ta,23}^{<} + G_{aa,33}^{r} \Sigma_{Ta,33}^{<} + G_{aa,34}^{r} \Sigma_{Ta,43}^{<} \right) + \\ &+ [G_{aa,34}^{r}]^{*} \left(G_{aa,31}^{r} \Sigma_{Ta,14}^{<} + G_{aa,32}^{r} \Sigma_{Ta,24}^{<} + G_{aa,33}^{r} \Sigma_{Ta,34}^{<} + G_{aa,34}^{r} \Sigma_{Ta,44}^{<} \right) \end{split}$$

Considerando a estrutura da auto-energia $\Sigma_{Ta}^{<}$, é possível fazer algumas simplificações iniciais. Tomando a componente $G_{aa,11}^{<}$ segue que:

$$\begin{split} G^{<}_{aa,11} &= |G^{r}_{aa,11}|^{2} \Sigma^{<}_{Ta,11} + |G^{r}_{aa,12}|^{2} \Sigma^{<}_{Ta,22} + |G^{r}_{aa,13}|^{2} \Sigma^{<}_{Ta,33} + |G^{r}_{aa,14}|^{2} \Sigma^{<}_{Ta,44} + \\ &+ \left([G^{r}_{aa,12}]^{*} G^{r}_{aa,14} + [G^{r}_{aa,14}]^{*} G^{r}_{aa,12} \right) \Sigma^{<}_{Ta,24} + \left([G^{r}_{aa,13}]^{*} G^{r}_{aa,11} + [G^{r}_{aa,11}]^{*} G^{r}_{aa,13} \right) \Sigma^{<}_{Ta,13} + \\ &+ [G^{r}_{aa,14}]^{*} G^{r}_{aa,13} \Sigma^{<}_{Ta,34} - [G^{r}_{aa,13}]^{*} G^{r}_{aa,14} [\Sigma^{<}_{Ta,34}]^{*} + [G^{r}_{aa,12}]^{*} G^{r}_{aa,11} \Sigma^{<}_{Ta,12} - [G^{r}_{aa,11}]^{*} G^{r}_{aa,12} [\Sigma^{<}_{Ta,12}]^{*} \end{split}$$

e tomando o complexo conjugado da equação acima tem-se ainda,

$$- [G_{aa,11}^{<}]^{*} = -|G_{aa,11}^{r}|^{2} [\Sigma_{Ta,11}^{<}]^{*} - |G_{aa,12}^{r}|^{2} [\Sigma_{Ta,22}^{<}]^{*} - |G_{aa,13}^{r}|^{2} [\Sigma_{Ta,33}^{<}]^{*} - |G_{aa,14}^{r}|^{2} [\Sigma_{Ta,44}^{<}]^{*} - ([G_{aa,12}^{r}]^{*} G_{aa,14}^{r} + [G_{aa,14}^{r}]^{*} G_{aa,12}^{r}) [\Sigma_{Ta,24}^{<}]^{*} - ([G_{aa,13}^{r}]^{*} G_{aa,11}^{r} + [G_{aa,11}^{r}]^{*} G_{aa,13}^{r}) [\Sigma_{Ta,34}^{<}]^{*} + [G_{aa,14}^{r}]^{*} G_{aa,13}^{r} \Sigma_{Ta,34}^{<} - [G_{aa,13}^{r}]^{*} G_{aa,14}^{r} + [G_{aa,14}^{r}]^{*} G_{aa,14}^{r} + [G_{aa,13}^{r}]^{*} G_{aa,14}^{r} + [G_{aa,14}^{r}]^{*} G_{aa,14}$$

e fazendo a subtração das duas equações anteriores, tem-se que,

$$\begin{split} G^{<}_{aa,11} - [G^{<}_{aa,11}]^* &= |G^{r}_{aa,11}|^2 \left(\Sigma^{<}_{Ta,11} - [\Sigma^{<}_{Ta,11}]^* \right) + |G^{r}_{aa,12}|^2 \left(\Sigma^{<}_{Ta,22} - [\Sigma^{<}_{Ta,22}]^* \right) \\ &+ |G^{r}_{aa,13}|^2 \left(\Sigma^{<}_{Ta,33} - [\Sigma^{<}_{Ta,33}]^* \right) + |G^{r}_{aa,14}|^2 \left(\Sigma^{<}_{Ta,44} - [\Sigma^{<}_{Ta,44}]^* \right) + \\ &+ \left([G^{r}_{aa,12}]^* G^{r}_{aa,14} + [G^{r}_{aa,14}]^* G^{r}_{aa,12} \right) \left(\Sigma^{<}_{Ta,24} - [\Sigma^{<}_{Ta,24}]^* \right) \\ &+ \left([G^{r}_{aa,13}]^* G^{r}_{aa,11} + [G^{r}_{aa,11}]^* G^{r}_{aa,13} \right) \left(\Sigma^{<}_{Ta,13} - [\Sigma^{<}_{Ta,13}]^* \right) + \\ &+ 2 [G^{r}_{aa,14}]^* G^{r}_{aa,13} \Sigma^{<}_{Ta,34} - 2 [G^{r}_{aa,13}]^* G^{r}_{aa,14} [\Sigma^{<}_{Ta,34}]^* + 2 [G^{r}_{aa,12}]^* G^{r}_{aa,11} \Sigma^{<}_{Ta,12} - 2 [G^{r}_{aa,11}]^* G^{r}_{aa,12} [\Sigma^{<}_{Ta,12}]^* \end{split}$$

Adotando o mesmo procedimento para a componente 33, pode ser mostrado que:

$$\begin{split} G_{aa,33}^{<} &- [G_{aa,33}^{<}]^{*} = |G_{aa,31}^{r}|^{2} \left(\Sigma_{Ta,11}^{<} - [\Sigma_{Ta,11}^{<}]^{*} \right) + |G_{aa,32}^{r}|^{2} \left(\Sigma_{Ta,22}^{<} - [\Sigma_{Ta,22}^{<}]^{*} \right) \\ &+ |G_{aa,33}^{r}|^{2} \left(\Sigma_{Ta,33}^{<} - [\Sigma_{Ta,33}^{<}]^{*} \right) + |G_{aa,34}^{r}|^{2} \left(\Sigma_{Ta,44}^{<} - [\Sigma_{Ta,44}^{<}]^{*} \right) + \\ &+ \left([G_{aa,32}^{r}]^{*}G_{aa,34}^{r} + [G_{aa,34}^{r}]^{*}G_{aa,32}^{r} \right) \left(\Sigma_{Ta,24}^{<} - [\Sigma_{Ta,24}^{<}]^{*} \right) \\ &+ \left([G_{aa,33}^{r}]^{*}G_{aa,31}^{r} + [G_{aa,31}^{r}]^{*}G_{aa,33}^{r} \right) \left(\Sigma_{Ta,13}^{<} - [\Sigma_{Ta,13}^{<}]^{*} \right) + \\ &+ 2[G_{aa,34}^{r}]^{*}G_{aa,33}^{r}\Sigma_{Ta,34}^{<} - 2[G_{aa,33}^{r}]^{*}G_{aa,34}^{r} [\Sigma_{Ta,34}^{<}]^{*} + 2[G_{aa,32}^{r}]^{*}G_{aa,31}^{r}\Sigma_{Ta,12}^{<} - 2[G_{aa,31}^{r}]^{*}G_{aa,32}^{r} [\Sigma_{Ta,12}^{<}]^{*}. \end{split}$$

Usando os resultados do apêndice B e do capítulo 3, pode-se mostrar que as componentes da auto-energia são dadas por,

$$\Sigma_{Ta,11}^{<} - [\Sigma_{Ta,11}^{<}]^{*} = 2i(c^{2}\Gamma_{2\uparrow} + s^{2}\Gamma_{2\downarrow})f_{2} + 2if_{1}\Gamma_{1\uparrow} + 2if\tilde{\rho}\Gamma_{s}X_{12}^{-}$$
(E.1.6a)

$$\Sigma_{Ta,22}^{<} - [\Sigma_{Ta,22}^{<}]^{*} = 2i(s^{2}\Gamma_{2\uparrow} + c^{2}\Gamma_{2\downarrow})\bar{f}_{2} + 2i\bar{f}_{1}\Gamma_{1\downarrow} + 2if\tilde{\rho}\Gamma_{s}Y_{21}^{-}$$
(E.1.6b)

$$\Sigma_{Ta,33}^{<} - [\Sigma_{Ta,33}^{<}]^{*} = 2i(s^{2}\Gamma_{2\uparrow} + c^{2}\Gamma_{2\downarrow})f_{2} + 2if_{1}\Gamma_{1\downarrow} + 2if\tilde{\rho}\Gamma_{s}X_{34}^{+}$$
(E.1.6c)

$$\Sigma_{Ta,44}^{<} - [\Sigma_{Ta,44}^{<}]^{*} = 2i(c^{2}\Gamma_{2\uparrow} + s^{2}\Gamma_{2\downarrow})\bar{f}_{2} + 2i\bar{f}_{1}\Gamma_{1\uparrow} + 2if\tilde{\rho}\Gamma_{s}Y_{43}^{+}$$
(E.1.6d)

$$\Sigma_{Ta,24}^{<} - [\Sigma_{Ta,24}^{<}]^{*} = 2isc(\Gamma_{2\uparrow} - \Gamma_{2\downarrow})f_{2}$$
(E.1.6e)

$$\Sigma_{Ta,13}^{<} - [\Sigma_{Ta,13}^{<}]^{*} = 2isc(\Gamma_{2\uparrow} - \Gamma_{2\downarrow})f_{2}$$
(E.1.6f)

$$\Sigma_{Ta,34}^{<} = -if\tilde{\rho}\Gamma_s Z_{34}^{+} \tag{E.1.6g}$$

$$\Sigma_{Ta,12}^{<} = -if\tilde{\rho}\Gamma_s Z_{12}^{-}.$$
(E.1.6h)

onde,

$$X_{ij}^{\pm} \equiv t_{ab}^{2} \left[|G_{bb,ii}^{r0}|^{2} + |G_{bb,ij}^{r0}|^{2} \pm \frac{\Delta}{\omega} \left(G_{bb,ii}^{r0} [G_{bb,ij}^{r0}]^{*} + G_{bb,ij}^{r0} [G_{bb,ii}^{r0}]^{*} \right) \right],$$
(E.1.7)

$$Y_{ij}^{\pm} \equiv t_{ab}^{2} \left[|G_{bb,ii}^{r0}|^{2} + |G_{bb,ji}^{r0}|^{2} \pm \frac{\Delta}{\omega} \left(G_{bb,ii}^{r0} [G_{bb,ji}^{r0}]^{*} + G_{bb,ji}^{r0} [G_{bb,ii}^{r0}]^{*} \right) \right].$$
(E.1.8)

$$Z_{ij}^{\pm} = t_{ab}^2 \left[G_{bb,ij}^{r0} [G_{bb,ij}^{r0}]^* + [G_{bb,ij}^{r0}]^* G_{bb,ii}^{r0} \pm \frac{\Delta}{\omega} \left(|G_{bb,ij}^{r0}|^2 + [G_{bb,jj}^{r0}]^* G_{bb,ii}^{r0} \right) \right],$$
(E.1.9)

Substituindo-se estes elementos de matriz na equação para $G_{aa,11}^{<} - [G_{aa,11}^{<}]^{*}$, segue que,

$$\begin{split} G_{aa,11}^{<} &- [G_{aa,11}^{<}]^{*} = |G_{aa,11}^{r}|^{2} \left[2i(c^{2}\Gamma_{2\uparrow} + s^{2}\Gamma_{2\downarrow})f_{2} + 2if_{1}\Gamma_{1\uparrow} + 2if\tilde{\rho}\Gamma_{s}X_{12}^{-} \right] \\ &+ |G_{aa,12}^{r}|^{2} \left[2i(s^{2}\Gamma_{2\uparrow} + c^{2}\Gamma_{2\downarrow})\bar{f}_{2} + 2i\bar{f}_{1}\Gamma_{1\downarrow} + 2if\tilde{\rho}\Gamma_{s}Y_{21}^{-} \right] \\ &+ |G_{aa,13}^{r}|^{2} \left[2i(s^{2}\Gamma_{2\uparrow} + c^{2}\Gamma_{2\downarrow})f_{2} + 2if_{1}\Gamma_{1\downarrow} + 2if\tilde{\rho}\Gamma_{s}X_{34}^{+} \right] \\ &+ |G_{aa,14}^{r}|^{2} \left[2i(c^{2}\Gamma_{2\uparrow} + s^{2}\Gamma_{2\downarrow})\bar{f}_{2} + 2i\bar{f}_{1}\Gamma_{1\uparrow} + 2if\tilde{\rho}\Gamma_{s}Y_{43}^{+} \right] \\ &+ \left[[G_{aa,12}^{r}]^{*}G_{aa,14}^{r} + [G_{aa,14}^{r}]^{*}G_{aa,12}^{r} \right] \left[2isc(\Gamma_{2\uparrow} - \Gamma_{2\downarrow})\bar{f}_{2} \right] \\ &+ \left[[G_{aa,13}^{r}]^{*}G_{aa,11}^{r} + [G_{aa,11}^{r}]^{*}G_{aa,13}^{r} \right] \left[2isc(\Gamma_{2\uparrow} - \Gamma_{2\downarrow})f_{2} \right] \\ &+ 2[G_{aa,14}^{r}]^{*}G_{aa,13}^{r} [-if\tilde{\rho}\Gamma_{s}Z_{34}^{+}] - 2[G_{aa,13}^{r}]^{*}G_{aa,14}^{r} [-if\tilde{\rho}\Gamma_{s}Z_{34}^{+}]^{*} + 2[G_{aa,12}^{r}]^{*}G_{aa,11}^{r} [-if\tilde{\rho}\Gamma_{s}Z_{12}^{-}]^{*} \\ &- 2[G_{aa,11}^{r}]^{*}G_{aa,12}^{r} [-if\tilde{\rho}\Gamma_{s}Z_{12}^{-}]^{*} \end{split}$$

e após alguma álgebra tem-se ainda,

$$\begin{split} \frac{1}{2i} \left(G_{aa,11}^{<} - [G_{aa,11}^{<}]^{*} \right) &= (c^{2}\Gamma_{2\uparrow} + s^{2}\Gamma_{2\downarrow}) |G_{aa,11}^{r}|^{2} f_{2} + |G_{aa,11}^{r}|^{2} f_{1}\Gamma_{1\uparrow} + f\tilde{\rho}\Gamma_{s}X_{12}^{-}|G_{aa,11}^{r}|^{2} \\ &+ (s^{2}\Gamma_{2\uparrow} + c^{2}\Gamma_{2\downarrow}) |G_{aa,12}^{r}|^{2} \bar{f}_{2} + |G_{aa,12}^{r}|^{2} \bar{f}_{1}\Gamma_{1\downarrow} + f\tilde{\rho}\Gamma_{s}Y_{21}^{-}|G_{aa,12}^{r}|^{2} + (s^{2}\Gamma_{2\uparrow} + c^{2}\Gamma_{2\downarrow}) |G_{aa,13}^{r}|^{2} f_{2} \\ &+ |G_{aa,13}^{r}|^{2} f_{1}\Gamma_{1\downarrow} + f\tilde{\rho}\Gamma_{s}X_{34}^{+}|G_{aa,13}^{r}|^{2} + (c^{2}\Gamma_{2\uparrow} + s^{2}\Gamma_{2\downarrow}) |G_{aa,14}^{r}|^{2} \bar{f}_{2} + |G_{aa,14}^{r}|^{2} \bar{f}_{1}\Gamma_{1\uparrow} + f\tilde{\rho}\Gamma_{s}Y_{43}^{+}|G_{aa,14}^{r}|^{2} \\ &+ \left[sc(\Gamma_{2\uparrow} - \Gamma_{2\downarrow}) [G_{aa,12}^{r}]^{*}G_{aa,14}^{r} + sc(\Gamma_{2\uparrow} - \Gamma_{2\downarrow}) [G_{aa,14}^{r}]^{*}G_{aa,12}^{r} \right] \bar{f}_{2} + \left[sc(\Gamma_{2\uparrow} - \Gamma_{2\downarrow}) [G_{aa,13}^{r}]^{*}G_{aa,11}^{r} \\ &+ sc(\Gamma_{2\uparrow} - \Gamma_{2\downarrow}) [G_{aa,11}^{r}]^{*}G_{aa,13}^{r} \right] f_{2} + f\tilde{\rho}\Gamma_{s} \left(- [G_{aa,14}^{r}]^{*}G_{aa,13}^{r}Z_{34}^{r} - [G_{aa,13}^{r}]^{*}G_{aa,14}^{r} [Z_{34}^{r}]^{*} \\ &- [G_{aa,12}^{r}]^{*}G_{aa,11}^{r}Z_{12}^{-} - [G_{aa,11}^{r}]^{*}G_{aa,12}^{r} [Z_{12}^{-}]^{*} \right), \end{split}$$

e rearranjando os termos tem-se finalmente:

$$\frac{1}{2i} \left(G_{aa,11}^{<} - [G_{aa,11}^{<}]^{*} \right) = f_{1} \left(|G_{aa,11}^{r}|^{2} \Gamma_{1\uparrow} + |G_{aa,13}^{r}|^{2} \Gamma_{1\downarrow} \right) + \bar{f}_{1} \left(|G_{aa,14}^{r}|^{2} \Gamma_{1\uparrow} + |G_{aa,12}^{r}|^{2} \Gamma_{1\downarrow} \right) + \\
+ \bar{f}_{2} \left((c^{2} \Gamma_{2\uparrow} + s^{2} \Gamma_{2\downarrow}) |G_{aa,14}^{r}|^{2} + (s^{2} \Gamma_{2\uparrow} + c^{2} \Gamma_{2\downarrow}) |G_{aa,12}^{r}|^{2} + sc(\Gamma_{2\uparrow} - \Gamma_{2\downarrow}) [G_{aa,12}^{r}]^{*} G_{aa,14}^{r} \\
+ sc(\Gamma_{2\uparrow} - \Gamma_{2\downarrow}) [G_{aa,14}^{r}]^{*} G_{aa,12}^{r} \right) + f_{2} \left((s^{2} \Gamma_{2\uparrow} + c^{2} \Gamma_{2\downarrow}) |G_{aa,13}^{r}|^{2} + (c^{2} \Gamma_{2\uparrow} + s^{2} \Gamma_{2\downarrow}) |G_{aa,11}^{r}|^{2} \\
+ sc(\Gamma_{2\uparrow} - \Gamma_{2\downarrow}) [G_{aa,13}^{r}]^{*} G_{aa,11}^{r} + sc(\Gamma_{2\uparrow} - \Gamma_{2\downarrow}) [G_{aa,11}^{r}]^{*} G_{aa,13}^{r} \right) + f \tilde{\rho} \Gamma_{s} \left(Y_{21}^{-} |G_{aa,12}^{r}|^{2} + X_{34}^{+} |G_{aa,13}^{r}|^{2} \\
+ Y_{43}^{+} |G_{aa,14}^{r}|^{2} + X_{12}^{-} |G_{aa,11}^{r}|^{2} - Z_{34}^{+} [G_{aa,14}^{r}]^{*} G_{aa,13}^{r} - [Z_{34}^{+}]^{*} [G_{aa,13}^{r}]^{*} G_{aa,12}^{r} \right). \quad (E.1.10)$$

Fazendo as substituições dos elementos de matriz da auto-energia na equação para $G^{<}_{aa,33} - [G^{<}_{aa,33}]^*$, e após efetuar as simplificações necessárias segue que:

$$\begin{aligned} \frac{1}{2i} \left(G_{aa,33}^{<} - [G_{aa,33}^{<}]^{*} \right) &= f_{1} \left(|G_{aa,31}^{r}|^{2} \Gamma_{1\uparrow} + |G_{aa,33}^{r}|^{2} \Gamma_{1\downarrow} \right) + \bar{f}_{1} \left(|G_{aa,34}^{r}|^{2} \Gamma_{1\uparrow} + |G_{aa,32}^{r}|^{2} \Gamma_{1\downarrow} \right) + \\ &+ \bar{f}_{2} \left((c^{2} \Gamma_{2\uparrow} + s^{2} \Gamma_{2\downarrow}) |G_{aa,34}^{r}|^{2} + (s^{2} \Gamma_{2\uparrow} + c^{2} \Gamma_{2\downarrow}) |G_{aa,32}^{r}|^{2} + sc(\Gamma_{2\uparrow} - \Gamma_{2\downarrow}) [G_{aa,32}^{r}]^{*} G_{aa,34}^{r} \\ &+ sc(\Gamma_{2\uparrow} - \Gamma_{2\downarrow}) [G_{aa,34}^{r}]^{*} G_{aa,32}^{r} \right) + f_{2} \left((s^{2} \Gamma_{2\uparrow} + c^{2} \Gamma_{2\downarrow}) |G_{aa,33}^{r}|^{2} + (c^{2} \Gamma_{2\uparrow} + s^{2} \Gamma_{2\downarrow}) |G_{aa,31}^{r}|^{2} \\ &+ sc(\Gamma_{2\uparrow} - \Gamma_{2\downarrow}) [G_{aa,33}^{r}]^{*} G_{aa,31}^{r} + sc(\Gamma_{2\uparrow} - \Gamma_{2\downarrow}) [G_{aa,31}^{r}]^{*} G_{aa,33}^{r} \right) + f \tilde{\rho} \Gamma_{s} \left(Y_{21}^{-} |G_{aa,32}^{r}|^{2} + X_{34}^{+} |G_{aa,33}^{r}|^{2} \\ &+ Y_{43}^{+} |G_{aa,34}^{r}|^{2} + X_{32}^{-} |G_{aa,31}^{r}|^{2} - Z_{34}^{+} [G_{aa,34}^{r}]^{*} G_{aa,33}^{r} - [Z_{34}^{+}]^{*} [G_{aa,33}^{r}]^{*} G_{aa,34}^{r} - Z_{12}^{-} [G_{aa,32}^{r}]^{*} G_{aa,31}^{r} \\ &- [Z_{12}^{-}]^{*} [G_{aa,31}^{r}]^{*} G_{aa,32}^{r} \right). \quad (E.1.11) \end{aligned}$$

Combinando as equações (E.1.10) e (E.1.11), pode-se determinar os dois primeiros termos da

equação (E.1.5), i.e.,

$$\begin{split} &-\frac{1}{2}i\Gamma_{1\uparrow}\left(G_{aa,11}^{<}-[G_{aa,11}^{<}]^{*}\right)-\frac{1}{2}i\Gamma_{1\downarrow}\left(G_{aa,33}^{<}-[G_{aa,33}^{<}]^{*}\right) = \\ &=f_{1}\Gamma_{1\uparrow}\left(|G_{aa,11}^{r}|^{2}\Gamma_{1\uparrow}+|G_{aa,13}^{r}|^{2}\Gamma_{1\downarrow}\right)+\bar{f}_{1}\Gamma_{1\uparrow}\left(|G_{aa,14}^{r}|^{2}\Gamma_{1\uparrow}+|G_{aa,12}^{r}|^{2}\Gamma_{1\downarrow}\right)+\bar{f}_{2}\Gamma_{1\uparrow}\left((c^{2}\Gamma_{2\uparrow}+s^{2}\Gamma_{2\downarrow})|G_{aa,14}^{r}|^{2}\Gamma_{4,1}+i^{2}\Gamma_{1\uparrow}\left((c^{2}\Gamma_{2\uparrow}+s^{2}\Gamma_{2\downarrow})|G_{aa,14}^{r}|^{2}\Gamma_{4,1}+i^{2}\Gamma_{1\uparrow}\left((c^{2}\Gamma_{2\uparrow}+s^{2}\Gamma_{2\downarrow})|G_{aa,14}^{r}|^{2}\Gamma_{4,1}+i^{2}\Gamma_{4$$

e fazendo algumas manipulações algébricas tem-se ainda,

$$\begin{split} &-\frac{1}{2}i\Gamma_{1\uparrow}\left(G_{aa,11}^{<}-[G_{aa,11}^{<}]^{*}\right)-\frac{1}{2}i\Gamma_{1\downarrow}\left(G_{aa,33}^{<}-[G_{aa,33}^{<}]^{*}\right) = \\ &=f_{1}\left[\Gamma_{1\uparrow}\left(|G_{aa,11}^{r}|^{2}\Gamma_{1\uparrow}+|G_{aa,13}^{r}|^{2}\Gamma_{1\downarrow}\right)+\Gamma_{1\downarrow}\left(|G_{aa,31}^{r}|^{2}\Gamma_{1\uparrow}+|G_{aa,33}^{r}|^{2}\Gamma_{1\downarrow}\right)\right] \\ &+\bar{f}_{1}\left[\Gamma_{1\uparrow}\left(|G_{aa,14}^{r}|^{2}\Gamma_{1\uparrow}+|G_{aa,12}^{r}|^{2}\Gamma_{1\downarrow}\right)+\Gamma_{1\downarrow}\left(|G_{aa,34}^{r}|^{2}\Gamma_{1\uparrow}+|G_{aa,32}^{r}|^{2}\Gamma_{1\downarrow}\right)\right] + \\ &+\bar{f}_{2}\left\{\Gamma_{1\uparrow}\left[(c^{2}\Gamma_{2\uparrow}+s^{2}\Gamma_{2\downarrow})|G_{aa,14}^{r}|^{2}+(s^{2}\Gamma_{2\uparrow}+c^{2}\Gamma_{2\downarrow})|G_{aa,12}^{r}|^{2} \\ &+sc(\Gamma_{2\uparrow}-\Gamma_{2\downarrow})[G_{aa,21}^{r}]^{*}G_{aa,34}^{r}|^{2}+(s^{2}\Gamma_{2\uparrow}+c^{2}\Gamma_{2\downarrow})|G_{aa,32}^{r}|^{2} \\ &+r_{1\downarrow}\left[(c^{2}\Gamma_{2\uparrow}+s^{2}\Gamma_{2\downarrow})|G_{aa,34}^{r}|^{2}+(s^{2}\Gamma_{2\uparrow}+c^{2}\Gamma_{2\downarrow})|G_{aa,32}^{r}|^{2} \\ &+sc(\Gamma_{2\uparrow}-\Gamma_{2\downarrow})[G_{aa,33}^{r}]^{*}G_{aa,34}^{r}+sc(\Gamma_{2\uparrow}-\Gamma_{2\downarrow})[G_{aa,34}^{r}]^{*}G_{aa,32}^{r}]\right\} \\ &+f_{2}\left\{\Gamma_{1\downarrow}\left[(s^{2}\Gamma_{2\uparrow}+c^{2}\Gamma_{2\downarrow})|G_{aa,33}^{r}|^{2}+(c^{2}\Gamma_{2\uparrow}+s^{2}\Gamma_{2\downarrow})|G_{aa,31}^{r}|^{2}+sc(\Gamma_{2\uparrow}-\Gamma_{2\downarrow})[G_{aa,33}^{r}]^{*}G_{aa,31}^{r} \\ &+sc(\Gamma_{2\uparrow}-\Gamma_{2\downarrow})[G_{aa,33}^{r}]^{*}G_{aa,33}^{r}\right]+\Gamma_{1\uparrow}\left[(s^{2}\Gamma_{2\uparrow}+c^{2}\Gamma_{2\downarrow})|G_{aa,13}^{r}|^{2}+sc(\Gamma_{2\uparrow}+s^{2}\Gamma_{2\downarrow})|G_{aa,11}^{r}|^{2} \\ &+sc(\Gamma_{2\uparrow}-\Gamma_{2\downarrow})[G_{aa,33}^{r}]^{*}G_{aa,33}^{r}\right]+\Gamma_{1\uparrow}\left[(s^{2}\Gamma_{2\uparrow}+c^{2}\Gamma_{2\downarrow})|G_{aa,13}^{r}|^{2}+(c^{2}\Gamma_{2\uparrow}+s^{2}\Gamma_{2\downarrow})|G_{aa,13}^{r}|^{2}+sc(\Gamma_{2\uparrow}+s^{2}\Gamma_{2\downarrow})|G_{aa,14}^{r}|^{2} \\ &+sc(\Gamma_{2\uparrow}-\Gamma_{2\downarrow})[G_{aa,13}^{r}]^{*}G_{aa,11}^{r}+sc(\Gamma_{2\uparrow}-\Gamma_{2\downarrow})[G_{aa,11}^{r}]^{*}G_{aa,13}^{r}]\right\}+f\tilde{\rho}\Gamma_{s}\left\{\Gamma_{1\uparrow}\left[Y_{2}^{-}|G_{aa,12}^{r}|^{2} \\ &+X_{34}^{+}|G_{aa,13}^{r}|^{2}+Y_{43}^{+}|G_{aa,14}^{r}|^{2}+X_{12}^{-}|G_{aa,11}^{r}|^{2}-Z_{34}^{+}|G_{aa,13}^{r}|^{3}+G_{aa,13}^{r}-[Z_{12}^{-}]^{*}|G_{aa,14}^{r}|^{2}+X_{12}^{-}|G_{aa,12}^{r}|^{2}+\Gamma_{1\downarrow}\left[Y_{2}^{-}|G_{aa,33}^{r}|^{2}+X_{34}^{+}|G_{aa,33}^{r}|^{2} \\ &+Y_{43}^{+}|G_{aa,34}^{r}|^{2}+X_{32}^{-}|G_{aa,31}^{r}|^{2}-Z_{34}^{+}|G_{aa,33}^{r}-[Z_{12}^{-}]^{*}|G_{aa,33}^{r}|^{2}+X_{34}^{+}|G_{aa,33}^{r}|^{2}+X_{34}^{+}|G_{aa,33}^{r}|^{2}+X_{34}^{+}|G_{aa,33}^{r}|^{2}+X_{34}^{-}|G_{aa,33}^{r}|^{2}+X_{34}^{+}|G_{aa,33}^{r}|^{2}+X_{34}^{-}|G_{aa,33}^{$$

Agora são definidas as seguintes quantidades:

$$H_{11} = \Gamma_{1\uparrow} \left(|G_{aa,11}^r|^2 \Gamma_{1\uparrow} + |G_{aa,13}^r|^2 \Gamma_{1\downarrow} \right) + \Gamma_{1\downarrow} \left(|G_{aa,31}^r|^2 \Gamma_{1\uparrow} + |G_{aa,33}^r|^2 \Gamma_{1\downarrow} \right)$$
(E.1.13a)

$$A_{11} = \Gamma_{1\uparrow} \left(|G_{aa,14}^r|^2 \Gamma_{1\uparrow} + |G_{aa,12}^r|^2 \Gamma_{1\downarrow} \right) + \Gamma_{1\downarrow} \left(|G_{aa,34}^r|^2 \Gamma_{1\uparrow} + |G_{aa,32}^r|^2 \Gamma_{1\downarrow} \right)$$
(E.1.13b)

$$A_{12} = \Gamma_{1\uparrow} \left[(c^2 \Gamma_{2\uparrow} + s^2 \Gamma_{2\downarrow}) |G_{aa,14}^r|^2 + (s^2 \Gamma_{2\uparrow} + c^2 \Gamma_{2\downarrow}) |G_{aa,12}^r|^2 + sc(\Gamma_{2\uparrow} - \Gamma_{2\downarrow}) [G_{aa,12}^r]^* G_{aa,14}^r \right]$$
(E.1.13c)

$$+sc(\Gamma_{2\uparrow} - \Gamma_{2\downarrow})[G^{r}_{aa,14}]^{*}G^{r}_{aa,12}] + \Gamma_{1\downarrow} \left[(c^{2}\Gamma_{2\uparrow} + s^{2}\Gamma_{2\downarrow})|G^{r}_{aa,34}|^{2} + (s^{2}\Gamma_{2\uparrow} + c^{2}\Gamma_{2\downarrow})|G^{r}_{aa,32}|^{2} + sc(\Gamma_{2\uparrow} - \Gamma_{2\downarrow})[G^{r}_{aa,32}]^{*}G^{r}_{aa,32}]^{*}G^{r}_{aa,34} + sc(\Gamma_{2\uparrow} - \Gamma_{2\downarrow})[G^{r}_{aa,34}]^{*}G^{r}_{aa,32} \right]$$

$$Q_{12} = \Gamma_{1\downarrow} \left[(s^2 \Gamma_{2\uparrow} + c^2 \Gamma_{2\downarrow}) |G_{aa,33}^r|^2 + (c^2 \Gamma_{2\uparrow} + s^2 \Gamma_{2\downarrow}) |G_{aa,31}^r|^2 + sc(\Gamma_{2\uparrow} - \Gamma_{2\downarrow}) [G_{aa,33}^r]^* G_{aa,31}^r \right]$$
(E.1.13d)

$$+sc(\Gamma_{2\uparrow} - \Gamma_{2\downarrow})[G^{r}_{aa,31}]^{*}G^{r}_{aa,33}] + \Gamma_{1\uparrow} \left[(s^{2}\Gamma_{2\uparrow} + c^{2}\Gamma_{2\downarrow})|G^{r}_{aa,13}|^{2} + (c^{2}\Gamma_{2\uparrow} + s^{2}\Gamma_{2\downarrow})|G^{r}_{aa,11}|^{2} + sc(\Gamma_{2\uparrow} - \Gamma_{2\downarrow})[G^{r}_{aa,13}]^{*}G^{r}_{aa,13} + sc(\Gamma_{2\uparrow} - \Gamma_{2\downarrow})[G^{r}_{aa,11}]^{*}G^{r}_{aa,13} \right]$$

$$\begin{split} Q_{1s} &= \tilde{\rho}\Gamma_{s}\left\{\Gamma_{1\uparrow}\left[Y_{21}^{-}|G_{aa,12}^{r}|^{2} + X_{34}^{+}|G_{aa,13}^{r}|^{2} + Y_{43}^{+}|G_{aa,14}^{r}|^{2} + X_{12}^{-}|G_{aa,11}^{r}|^{2} - Z_{34}^{+}[G_{aa,14}^{r}]^{*}G_{aa,13}^{r}\right] - [Z_{34}^{+}]^{*}[G_{aa,13}^{r}]^{*}G_{aa,14}^{r} - Z_{12}^{-}[G_{aa,12}^{r}]^{*}G_{aa,11}^{r} - [Z_{12}^{-}]^{*}[G_{aa,11}^{r}]^{*}G_{aa,12}^{r}\right] + \Gamma_{1\downarrow}\left[Y_{21}^{-}|G_{aa,32}^{r}|^{2} + X_{34}^{+}|G_{aa,33}^{r}|^{2} + Y_{43}^{+}|G_{aa,34}^{r}|^{2} + X_{32}^{-}|G_{aa,31}^{r}|^{2} - Z_{34}^{+}[G_{aa,34}^{r}]^{*}G_{aa,33}^{r} - [Z_{34}^{+}]^{*}[G_{aa,33}^{r}]^{*}G_{aa,34}^{r} - Z_{12}^{-}[G_{aa,32}^{r}]^{*}G_{aa,31}^{r}\right] - [Z_{12}^{-}]^{*}[G_{aa,31}^{r}]^{*}G_{aa,33}^{r} - [Z_{12}^{-}]^{*}[G_{aa,31}^{r}]^{*}G_{aa,32}^{r}\right] \right\} \\ (E.1.13e) \end{split}$$

e substituindo estas definições na equação (E.1.12) segue que,

$$\frac{1}{2}i\Gamma_{1\uparrow}\left(G_{aa,11}^{<}-[G_{aa,11}^{<}]^{*}\right)+\frac{1}{2}i\Gamma_{1\downarrow}\left(G_{aa,33}^{<}-[G_{aa,33}^{<}]^{*}\right)=-H_{11}f_{1}-A_{11}\bar{f}_{1}-A_{12}\bar{f}_{2}-Q_{12}f_{2}-Q_{1s}f.$$
(E.1.14)

Antes de determinar os termos restantes da equação (E.1.5), é necessário determinar a subtração das funções de Green avançada e retardada. Estas funções de Green são dadas pelas equações de Dyson, obtidas no capítulo 3. Para o ponto quântico a, a função de Green \mathbf{G}_{aa}^r é dada por (3.2.16):

$$\mathbf{G}_{aa}^{r}(\omega) = \mathbf{G}_{aa}^{r0}(\omega) + \mathbf{G}_{aa}^{r} \mathbf{t}_{ab}^{\dagger} \mathbf{G}_{bb}^{r0} \mathbf{t}_{ab} \mathbf{G}_{aa}^{r0}(\omega)$$

e isolando a função de Green $\mathbf{G}_{aa}^{r}(\omega),$ pode-se reescrever esta equação da seguinte forma,

$$\begin{split} \mathbf{G}_{aa}^{r}[\mathbf{1}-\mathbf{t}_{ab}^{\dagger}\mathbf{G}_{bb}^{r0}\mathbf{t}_{ab}\mathbf{G}_{aa}^{r0}(\omega)] &= \mathbf{G}_{aa}^{r0}(\omega) \\ ([\mathbf{G}_{aa}^{r0}(\omega)]^{-1}-\mathbf{t}_{ab}^{\dagger}\mathbf{G}_{bb}^{r0}\mathbf{t}_{ab})\mathbf{G}_{aa}^{r} &= \mathbf{1} \end{split}$$

ou ainda,

$$[\mathbf{G}_{aa}^{r}]^{-1} = [\mathbf{G}_{aa}^{r0}(\omega)]^{-1} - \mathbf{t}_{ab}^{\dagger}\mathbf{G}_{bb}^{r0}\mathbf{t}_{ab}.$$

A função de Green avançada é dada por (3.2.18), que após alguma manipulação algébrica pode ser colocada na forma:

$$[\mathbf{G}_{aa}^{a}]^{-1} = [\mathbf{G}_{aa}^{a0}(\omega)]^{-1} - \mathbf{t}_{ab}^{\dagger}\mathbf{G}_{bb}^{a0}\mathbf{t}_{ab}$$

Usando a identidade,

$$\mathbf{G}_{aa}^{a} - \mathbf{G}_{aa}^{r} = \mathbf{G}_{aa}^{r} \left\{ [\mathbf{G}_{aa}^{r}]^{-1} - [\mathbf{G}_{aa}^{a}]^{-1} \right\} \mathbf{G}_{aa}^{a},$$

e substituindo as funções de Green inversas tem-se que,

$$\mathbf{G}_{aa}^{a} - \mathbf{G}_{aa}^{r} = \mathbf{G}_{aa}^{r} \left\{ [\mathbf{G}_{aa}^{r0}(\omega)]^{-1} - [\mathbf{G}_{aa}^{a0}(\omega)]^{-1} + \mathbf{t}_{ab}^{\dagger} \mathbf{G}_{bb}^{a0} \mathbf{t}_{ab} - \mathbf{t}_{ab}^{\dagger} \mathbf{G}_{bb}^{r0} \mathbf{t}_{ab} \right\} \mathbf{G}_{aa}^{a}$$

$$\mathbf{G}_{aa}^{a} - \mathbf{G}_{aa}^{r} = \mathbf{G}_{aa}^{r} \left\{ [\mathbf{G}_{aa}^{r0}(\omega)]^{-1} - [\mathbf{G}_{aa}^{a0}(\omega)]^{-1} + \mathbf{t}_{ab}^{\dagger} \left(\mathbf{G}_{bb}^{a0} - \mathbf{G}_{bb}^{r0} \right) \mathbf{t}_{ab} \right\} \mathbf{G}_{aa}^{a}$$
(E.1.15)

A diferença entre as funções de Green inversas é dada por,

$$[\mathbf{G}_{aa}^{r0}(\omega)]^{-1} - [\mathbf{G}_{aa}^{a0}(\omega)]^{-1} = \omega \mathbf{I} - \mathbf{H}_{a}' - \boldsymbol{\Sigma}_{L}^{r}(\omega) - \left(\omega \mathbf{I} - \mathbf{H}_{a}' - \boldsymbol{\Sigma}_{L}^{a}(\omega)\right)$$

ou seja,

$$[\mathbf{G}_{aa}^{r0}(\omega)]^{-1} - [\mathbf{G}_{aa}^{a0}(\omega)]^{-1} = \boldsymbol{\Sigma}_{L}^{a}(\omega) - \boldsymbol{\Sigma}_{L}^{r}(\omega)$$

A outra diferença entre as funções de Green \mathbf{G}_{bb}^{r0} e \mathbf{G}_{bb}^{a0} também pode ser determinada diretamente, i.e,

$$\mathbf{G}_{bb}^{a0} - \mathbf{G}_{bb}^{r0} = \mathbf{G}_{bb}^{r0} \left([\mathbf{G}_{bb}^{r0}]^{-1} - [\mathbf{G}_{bb}^{a0}]^{-1} \right) \mathbf{G}_{bb}^{a0} = \mathbf{G}_{bb}^{r0} \left[\mathbf{\Sigma}_{R}^{a}(\omega) - \mathbf{\Sigma}_{R}^{r}(\omega) \right] \mathbf{G}_{bb}^{a0}$$

Aqui será definida a chamada matriz de acoplamento;

$$\boldsymbol{\Gamma}_i(\omega) = \boldsymbol{\Sigma}_i^a - \boldsymbol{\Sigma}_i^r \qquad i = L, R$$

o que permite escrever (E.1.15) da seguinte forma,

$$\mathbf{G}_{aa}^{a} - \mathbf{G}_{aa}^{r} = \mathbf{G}_{aa}^{r} \mathbf{\Gamma}_{L} \mathbf{G}_{aa}^{a} + \mathbf{G}_{aa}^{r} \mathbf{t}_{ab}^{\dagger} \mathbf{G}_{bb}^{r0} \mathbf{\Gamma}_{R} \mathbf{G}_{bb}^{a0} \mathbf{t}_{ab} \mathbf{G}_{aa}^{a}$$
(E.1.16)

ou ainda,

$$\mathbf{G}_{aa}^{a}-\mathbf{G}_{aa}^{r}=\mathbf{G}_{aa}^{r}\left(\mathbf{\Gamma}_{L}+\mathbf{t}_{ab}^{\dagger}\mathbf{G}_{bb}^{r0}\mathbf{\Gamma}_{R}\mathbf{G}_{bb}^{a0}\mathbf{t}_{ab}
ight)\mathbf{G}_{aa}^{a}$$

e definindo,

$$\Gamma_{Ta} = \Gamma_L + \mathbf{t}_{ab}^{\dagger} \mathbf{G}_{bb}^{r0} \Gamma_R \mathbf{G}_{bb}^{a0} \mathbf{t}_{ab}$$
(E.1.17)

segue que:

$$\mathbf{G}_{aa}^{a} - \mathbf{G}_{aa}^{r} = \mathbf{G}_{aa}^{r} \mathbf{\Gamma}_{Ta} \mathbf{G}_{aa}^{a}.$$
 (E.1.18)

A equação (E.1.18) apresenta uma forma similar à equação de Keldysh para a função de Green $\mathbf{G}^{<}_{aa},$

$$\begin{split} \mathbf{G}_{aa}^{<} &= \mathbf{G}_{aa}^{r}(\omega) \boldsymbol{\Sigma}_{Ta}^{<} \mathbf{G}_{aa}^{a}(\omega) \\ \mathbf{\Sigma}_{T}^{<} &= \boldsymbol{\Sigma}_{L}^{<} + \mathbf{t}_{ab}^{\dagger} \mathbf{G}_{bb}^{r0} \boldsymbol{\Sigma}_{s}^{<} \mathbf{G}_{bb}^{a0} \mathbf{t}_{ab} \end{split}$$

exceto que nesta última as auto-energias Σ estão no lugar das funções de Γ . Estas últimas são similares às auto-energias exceto que nas funções Γ não aparecem as funções de Fermi. Desta forma as componentes $G^r_{aa,11} - G^a_{aa,11}$ e $G^r_{aa,33} - G^a_{aa,33}$ pode ser obtidas diretamente de $G^{<}_{aa,11}$ e $G^{<}_{aa,33}$ apenas suprimindo as funções de Fermi. Desta forma segue que:

$$\begin{split} G^{r}_{aa,11} - G^{a}_{aa,11} &= \\ &- i \left\{ \left(|G^{r}_{aa,11}|^{2} \Gamma_{1\uparrow} + |G^{r}_{aa,13}|^{2} \Gamma_{1\downarrow} \right) + \left(|G^{r}_{aa,14}|^{2} \Gamma_{1\uparrow} + |G^{r}_{aa,12}|^{2} \Gamma_{1\downarrow} \right) + (c^{2} \Gamma_{2\uparrow} + s^{2} \Gamma_{2\downarrow}) |G^{r}_{aa,14}|^{2} \\ &+ (s^{2} \Gamma_{2\uparrow} + c^{2} \Gamma_{2\downarrow}) |G^{r}_{aa,12}|^{2} + sc(\Gamma_{2\uparrow} - \Gamma_{2\downarrow}) [G^{r}_{aa,12}]^{*} G^{r}_{aa,14} + sc(\Gamma_{2\uparrow} - \Gamma_{2\downarrow}) [G^{r}_{aa,14}]^{*} G^{r}_{aa,12} + \\ &+ (s^{2} \Gamma_{2\uparrow} + c^{2} \Gamma_{2\downarrow}) |G^{r}_{aa,13}|^{2} + (c^{2} \Gamma_{2\uparrow} + s^{2} \Gamma_{2\downarrow}) |G^{r}_{aa,11}|^{2} + sc(\Gamma_{2\uparrow} - \Gamma_{2\downarrow}) [G^{r}_{aa,13}]^{*} G^{r}_{aa,11} \\ &+ sc(\Gamma_{2\uparrow} - \Gamma_{2\downarrow}) [G^{r}_{aa,11}]^{*} G^{r}_{aa,13} + \tilde{\rho} \Gamma_{s} \left[Y^{-}_{2\uparrow} |G^{r}_{aa,12}|^{2} + X^{+}_{34} |G^{r}_{aa,13}|^{2} + Y^{+}_{43} |G^{r}_{aa,14}|^{2} + X^{-}_{12} |G^{r}_{aa,11}|^{2} \\ &- Z^{+}_{34} [G^{r}_{aa,14}]^{*} G^{r}_{aa,13} - [Z^{+}_{34}]^{*} [G^{r}_{aa,13}]^{*} G^{r}_{aa,14} - Z^{-}_{12} [G^{r}_{aa,12}]^{*} G^{r}_{aa,11} - [Z^{-}_{12}]^{*} [G^{r}_{aa,11}]^{*} G^{r}_{aa,12} \right] \right\} \end{split}$$

e,

$$\begin{split} G^{r}_{aa,33} - G^{a}_{aa,33} &= \\ &- i \left\{ \left(|G^{r}_{aa,31}|^{2} \Gamma_{1\uparrow} + |G^{r}_{aa,33}|^{2} \Gamma_{1\downarrow} \right) + \left(|G^{r}_{aa,34}|^{2} \Gamma_{1\uparrow} + |G^{r}_{aa,32}|^{2} \Gamma_{1\downarrow} \right) + (c^{2} \Gamma_{2\uparrow} + s^{2} \Gamma_{2\downarrow}) |G^{r}_{aa,34}|^{2} + \\ &+ (s^{2} \Gamma_{2\uparrow} + c^{2} \Gamma_{2\downarrow}) |G^{r}_{aa,32}|^{2} + sc(\Gamma_{2\uparrow} - \Gamma_{2\downarrow}) [G^{r}_{aa,32}]^{*} G^{r}_{aa,34} + sc(\Gamma_{2\uparrow} - \Gamma_{2\downarrow}) [G^{r}_{aa,34}]^{*} G^{r}_{aa,32} + \\ &+ (s^{2} \Gamma_{2\uparrow} + c^{2} \Gamma_{2\downarrow}) |G^{r}_{aa,33}|^{2} + (c^{2} \Gamma_{2\uparrow} + s^{2} \Gamma_{2\downarrow}) |G^{r}_{aa,31}|^{2} + sc(\Gamma_{2\uparrow} - \Gamma_{2\downarrow}) [G^{r}_{aa,33}]^{*} G^{r}_{aa,31} \\ &+ sc(\Gamma_{2\uparrow} - \Gamma_{2\downarrow}) [G^{r}_{aa,31}]^{*} G^{r}_{aa,33} + \tilde{\rho} \Gamma_{s} \left[Y^{-}_{21} |G^{r}_{aa,32}|^{2} + X^{+}_{34} |G^{r}_{aa,33}|^{2} + Y^{+}_{43} |G^{r}_{aa,34}|^{2} + X^{-}_{32} |G^{r}_{aa,31}|^{2} \\ &- Z^{+}_{34} [G^{r}_{aa,34}]^{*} G^{r}_{aa,33} - [Z^{+}_{34}]^{*} [G^{r}_{aa,33}]^{*} G^{r}_{aa,34} - Z^{-}_{12} [G^{r}_{aa,32}]^{*} G^{r}_{aa,31} - [Z^{-}_{12}]^{*} [G^{r}_{aa,31}]^{*} G^{r}_{aa,32} \right] \right\}. \end{split}$$

Com estes resultados, o termo $if_1\Gamma_{1\uparrow}\left(G^r_{aa,11}-G^a_{aa,11}\right)+if_1\Gamma_{1\downarrow}\left(G^r_{aa,33}-G^a_{aa,33}\right)$ pode ser escrito

da seguinte maneira:

$$\begin{split} if_{1}\Gamma_{1\uparrow}\left(G_{aa,11}^{r}-G_{aa,11}^{a}\right)+if_{1}\Gamma_{1\downarrow}\left(G_{aa,33}^{r}-G_{aa,33}^{a}\right) &= [if_{1}\Gamma_{1\uparrow}]\times\\ \left\{-i[\left(|G_{aa,11}^{r}|^{2}\Gamma_{1\uparrow}+|G_{aa,13}^{r}|^{2}\Gamma_{1\downarrow}\right)+\left(|G_{aa,14}^{r}|^{2}\Gamma_{1\uparrow}+|G_{aa,12}^{r}|^{2}\Gamma_{1\downarrow}\right)+\left((c^{2}\Gamma_{2\uparrow}+s^{2}\Gamma_{2\downarrow})|G_{aa,14}^{r}|^{2}+(s^{2}\Gamma_{2\uparrow}+c^{2}\Gamma_{2\downarrow})|G_{aa,12}^{r}|^{2}+sc(\Gamma_{2\uparrow}-\Gamma_{2\downarrow})[G_{aa,12}^{r}]^{*}G_{aa,14}^{r}+sc(\Gamma_{2\uparrow}-\Gamma_{2\downarrow})[G_{aa,14}^{r}]^{*}G_{aa,12}^{r}\right)+\\ &+\left((s^{2}\Gamma_{2\uparrow}+c^{2}\Gamma_{2\downarrow})|G_{aa,13}^{r}|^{2}+(c^{2}\Gamma_{2\uparrow}+s^{2}\Gamma_{2\downarrow})|G_{aa,11}^{r}|^{2}+sc(\Gamma_{2\uparrow}-\Gamma_{2\downarrow})[G_{aa,13}^{r}]^{*}G_{aa,11}^{r}\right)\\ &+sc(\Gamma_{2\uparrow}-\Gamma_{2\downarrow})[G_{aa,11}^{r}]^{*}G_{aa,13}^{r}\right)+\tilde{\rho}\Gamma_{s}\left(Y_{21}^{-}|G_{aa,12}^{r}|^{2}+X_{34}^{+}|G_{aa,13}^{r}|^{2}\right)\\ &+Y_{43}^{+}|G_{aa,14}^{r}|^{2}+X_{12}^{-}|G_{aa,11}^{r}|^{2}-Z_{34}^{+}|G_{aa,13}^{r}|^{*}G_{aa,13}^{r}|^{2}\\ &-\left[Z_{4}^{+}]^{*}[G_{aa,33}^{r}]^{*}G_{aa,14}^{r}-Z_{12}^{-}[G_{aa,12}^{r}]^{*}G_{aa,11}^{r}-[Z_{12}^{-}]^{*}[G_{aa,11}^{r}]^{*}G_{aa,12}^{r}]\right]\right\}+\left[if_{1}\Gamma_{1\downarrow}\right]\times\\ \left\{-i[\left(|G_{aa,31}^{r}|^{2}\Gamma_{1\uparrow}+|G_{aa,33}^{r}|^{2}\Gamma_{1\downarrow}\right)+\left(|G_{aa,34}^{r}|^{2}\Gamma_{1\uparrow}+|G_{aa,32}^{r}|^{2}\Gamma_{1\downarrow}\right)+\left((c^{2}\Gamma_{2\uparrow}+s^{2}\Gamma_{2\downarrow})|G_{aa,34}^{r}|^{2}+\right.\\ &+\left(s^{2}\Gamma_{2\uparrow}+c^{2}\Gamma_{2\downarrow}\right)|G_{aa,32}^{r}|^{2}+sc(\Gamma_{2\uparrow}-\Gamma_{2\downarrow})[G_{aa,32}^{r}]^{*}G_{aa,34}^{r}+sc(\Gamma_{2\uparrow}-\Gamma_{2\downarrow})[G_{aa,34}^{r}]^{*}G_{aa,32}^{r}\right)+\right.\\ \left.+sc(\Gamma_{2\uparrow}-\Gamma_{2\downarrow})[G_{aa,33}^{r}]^{2}+\left(c^{2}\Gamma_{2\uparrow}+s^{2}\Gamma_{2\downarrow}\right)|G_{aa,33}^{r}|^{2}+sc(\Gamma_{2\uparrow}-\Gamma_{2\downarrow})[G_{aa,33}^{r}]^{*}G_{aa,33}^{r}\right]\right\}\\ \left.+sc(\Gamma_{2\uparrow}-\Gamma_{2\downarrow})[G_{aa,31}^{r}]^{*}G_{aa,33}^{r}]^{2}+\left(c^{2}\Gamma_{2\uparrow}+s^{2}\Gamma_{2\downarrow}\right)|G_{aa,33}^{r}|^{2}+Y_{43}^{+}|G_{aa,34}^{r}|^{2}+X_{32}^{-}|G_{aa,33}^{r}|^{2}\right]\right\}$$

e, reagrupando os termos e usando as definições dadas pelas equações (E.1.13a) a (E.1.13e) pode-se escrever finalmente:

$$if_{1}\Gamma_{1\uparrow}\left(G_{aa,11}^{r}-G_{aa,11}^{a}\right)+if_{1}\Gamma_{1\downarrow}\left(G_{aa,33}^{r}-G_{aa,33}^{a}\right)=f_{1}\left(H_{11}+A_{11}+A_{12}+Q_{12}+Q_{13}\right).$$
 (E.1.19)

Substituindo-se as equações (E.1.14) e (E.1.19) em (E.1.5) segue que,

$$\begin{split} \left[\mathbf{G}_{aa}^{r}(\omega)\boldsymbol{\Sigma}_{1}^{<}(\omega) + \mathbf{G}_{aa}^{<}(\omega)\boldsymbol{\Sigma}_{1}^{a}(\omega) + \mathrm{H.c.}\right]_{11+33} &= f_{1}\left(H_{11} + A_{11} + A_{12} + Q_{12} + Q_{1s}\right) \\ &- H_{11}f_{1} - A_{11}\bar{f}_{1} - A_{12}\bar{f}_{2} - Q_{12}f_{2} - Q_{1s}f \end{split}$$

ou ainda,

$$\begin{bmatrix} \mathbf{G}_{aa}^{r}(\omega) \mathbf{\Sigma}_{1}^{<}(\omega) + \mathbf{G}_{aa}^{<}(\omega) \mathbf{\Sigma}_{1}^{a}(\omega) + \text{H.c.} \end{bmatrix}_{11+33} = A_{11}(f_{1} - \bar{f}_{1}) + A_{12}(f_{1} - \bar{f}_{2}) + Q_{12}(f_{1} - f_{2}) + Q_{1s}(f_{1} - f) \quad (\text{E.1.20})$$

e substituindo (E.1.20) em (E.1.1) tem-se finalmente que:

$$I_1 = \frac{e}{h} \int d\omega \left[A_{11}(f_1 - \bar{f}_1) + A_{12}(f_1 - \bar{f}_2) + Q_{12}(f_1 - f_2) + Q_{1s}(f_1 - f) \right].$$
(E.1.21)

que a fórmula para a corrente dada pela equação (3.3.4)no capítulo 3.

E.2 Corrente I_2

A corrente I_2 é dada pela equação (3.3.8) do capítulo 3:

$$I_2 = \frac{e}{h} \int d\omega \left[\mathbf{G}_{aa}^r(\omega) \boldsymbol{\Sigma}_2^<(\omega) + \mathbf{G}_{aa}^<(\omega) \boldsymbol{\Sigma}_2^a(\omega) + \text{H.c.} \right]_{11+33}$$
(E.2.1)

O integrando pode ser escrito explicitamente da seguinte forma,

$$\begin{split} \mathbf{G}_{aa}^{r}(\omega) \mathbf{\Sigma}_{2}^{<}(\omega) + \mathbf{G}_{aa}^{<}(\omega) \mathbf{\Sigma}_{2}^{a}(\omega) + \mathrm{H.c.} \\ &= \mathbf{G}_{aa}^{r}(\omega) \mathbf{\Sigma}_{2}^{<}(\omega) + \mathbf{G}_{aa}^{<}(\omega) \mathbf{\Sigma}_{2}^{a}(\omega) + [\mathbf{\Sigma}_{2}^{<}(\omega)]^{\dagger} \mathbf{G}_{aa}^{a}(\omega) + \mathbf{\Sigma}_{2}^{r}(\omega) [\mathbf{G}_{aa}^{<}(\omega)]^{\dagger} \end{split}$$

As auto-energias foram determinadas no apêndice B. Para o ferromagneto 2, a auto-energia de correlação $\Sigma_2^<$ é dada por,

$$\boldsymbol{\Sigma}_{2}^{<}(\omega) = \mathbf{F}_{2}(\omega) [\boldsymbol{\Sigma}_{2}^{a}(\omega) - \boldsymbol{\Sigma}_{2}^{r}(\omega)]$$
(E.2.2)

desde que as auto-energias avançada e retardada são dadas por,

$$\boldsymbol{\Sigma}_{2}^{r,a}(\omega) = \mp \frac{i}{2} \begin{bmatrix} c^{2}\Gamma_{2\uparrow} + s^{2}\Gamma_{2\downarrow} & 0 & sc(\Gamma_{2\uparrow} - \Gamma_{2\downarrow}) & 0\\ 0 & s^{2}\Gamma_{2\uparrow} + c^{2}\Gamma_{2\downarrow} & 0 & sc(\Gamma_{2\uparrow} - \Gamma_{2\downarrow})\\ sc(\Gamma_{2\uparrow} - \Gamma_{2\downarrow}) & 0 & s^{2}\Gamma_{2\uparrow} + c^{2}\Gamma_{2\downarrow} & 0\\ 0 & sc(\Gamma_{2\uparrow} - \Gamma_{2\downarrow}) & 0 & c^{2}\Gamma_{2\uparrow} + s^{2}\Gamma_{2\downarrow} \end{bmatrix}, \quad (E.2.3)$$

então segue que,

$$\Sigma_{2}^{<}(\omega) = i \begin{bmatrix} (c^{2}\Gamma_{2\uparrow} + s^{2}\Gamma_{2\downarrow})f_{2} & 0 & sc(\Gamma_{2\uparrow} - \Gamma_{2\downarrow})f_{2} & 0 \\ 0 & (s^{2}\Gamma_{2\uparrow} + c^{2}\Gamma_{2\downarrow})\bar{f}_{2} & 0 & sc(\Gamma_{2\uparrow} - \Gamma_{2\downarrow})\bar{f}_{2} \\ sc(\Gamma_{2\uparrow} - \Gamma_{2\downarrow})f_{2} & 0 & (s^{2}\Gamma_{2\uparrow} + c^{2}\Gamma_{2\downarrow})f_{2} & 0 \\ 0 & sc(\Gamma_{2\uparrow} - \Gamma_{2\downarrow})\bar{f}_{2} & 0 & (c^{2}\Gamma_{2\uparrow} + s^{2}\Gamma_{2\downarrow})\bar{f}_{2} \end{bmatrix}.$$
(E.2.4)

Fazendo-se as multiplicações matriciais necessárias pode-se obter as componentes 11 e 33 para o elétron na notação de Nambu, as quais são dadas por,

$$\begin{split} \left[\mathbf{G}_{aa}^{r}(\omega)\mathbf{\Sigma}_{2}^{<}(\omega) + \mathbf{G}_{aa}^{<}(\omega)\mathbf{\Sigma}_{2}^{a}(\omega) + \mathrm{H.c.}\right]_{11+33} = \\ & \frac{i}{2}G_{aa,11}^{<}\left(c^{2}\Gamma_{2\uparrow} + s^{2}\Gamma_{2\downarrow}\right) + if_{2}G_{aa,11}^{r}\left(c^{2}\Gamma_{2\uparrow} + s^{2}\Gamma_{2\downarrow}\right) + \frac{i}{2}G_{aa,33}^{<}\left(c^{2}\Gamma_{2\downarrow} + s^{2}\Gamma_{2\uparrow}\right) \\ & + if_{2}G_{aa,33}^{r}\left(c^{2}\Gamma_{2\downarrow} + s^{2}\Gamma_{2\uparrow}\right) + \frac{i}{2}cs\left(\Gamma_{2\uparrow} - \Gamma_{2\downarrow}\right)\left[G_{aa,13}^{<} + G_{aa,31}^{<}\right] + icsf_{2}\left(\Gamma_{2\uparrow} - \Gamma_{2\downarrow}\right)\left[G_{aa,13}^{r} + G_{aa,31}^{r}\right] \\ & - if_{2}\left(s^{2}\Gamma_{2\downarrow} + c^{2}\Gamma_{2\uparrow}\right)\left[G_{aa,11}^{r}\right]^{*} - if_{2}\left(s^{2}\Gamma_{2\downarrow} + c^{2}\Gamma_{2\uparrow}\right)\left[G_{aa,33}^{<}\right]^{*} - icsf_{2}\left(\Gamma_{2\uparrow} - \Gamma_{2\downarrow}\right)\left(\left[G_{aa,13}^{r}\right]^{*} + \left[G_{aa,33}^{r}\right]^{*}\right) \\ & - \frac{i}{2}\left(s^{2}\Gamma_{2\downarrow} + c^{2}\Gamma_{2\uparrow}\right)\left[G_{aa,11}^{<}\right]^{*} - \frac{i}{2}\left(c^{2}\Gamma_{2\downarrow} + s^{2}\Gamma_{2\uparrow}\right)\left[G_{aa,33}^{<}\right]^{*} - \frac{i}{2}cs\left(\Gamma_{2\uparrow} - \Gamma_{2\downarrow}\right)\left(\left[G_{aa,13}^{<}\right]^{*} + \left[G_{aa,33}^{<}\right]^{*}\right) \end{split}$$

e, rearranjando os termos, tem-se ainda que,

$$\begin{split} \left[\mathbf{G}_{aa}^{r}(\omega)\boldsymbol{\Sigma}_{2}^{<}(\omega) + \mathbf{G}_{aa}^{<}(\omega)\boldsymbol{\Sigma}_{2}^{a}(\omega) + \mathrm{H.c.}\right]_{11+33} = \\ &= \frac{i}{2}\left(G_{aa,11}^{<} - [G_{aa,11}^{<}]^{*}\right)\left(c^{2}\Gamma_{2\uparrow} + s^{2}\Gamma_{2\downarrow}\right) + if_{2}\left(G_{aa,11}^{r} - [G_{aa,11}^{r}]^{*}\right)\left(c^{2}\Gamma_{2\uparrow} + s^{2}\Gamma_{2\downarrow}\right) + \\ &+ \frac{i}{2}\left(G_{aa,33}^{<} - [G_{aa,33}^{<}]^{*}\right)\left(c^{2}\Gamma_{2\downarrow} + s^{2}\Gamma_{2\uparrow}\right) + if_{2}\left(G_{aa,33}^{r} - [G_{aa,33}^{r}]^{*}\right)\left(c^{2}\Gamma_{2\downarrow} + s^{2}\Gamma_{2\uparrow}\right) + \\ &+ \frac{i}{2}cs\left(\Gamma_{2\uparrow} - \Gamma_{2\downarrow}\right)\left[G_{aa,13}^{<} - [G_{aa,13}^{<}]^{*} + G_{aa,31}^{<} - [G_{aa,31}^{<}]^{*}\right] \\ &+ icsf_{2}\left(\Gamma_{2\uparrow} - \Gamma_{2\downarrow}\right)\left[G_{aa,13}^{r} - [G_{aa,13}^{r}]^{*} + G_{aa,31}^{r} - [G_{aa,31}^{r}]^{*}\right] \end{split}$$
(E.2.5)

Nota-se que a equação (E.2.5) é mais complexa comparada com o caso da corrente I_1 . Isso deve-se ao fato da polarização do ferromagneto 2 estar orientada a um ângulo θ de modo que existem termos não diagonais da função de Green. Para resolver a expressão (E.2.5), primeiramente serão determinadas as componentes não diagonais 13 e 31 da função de Green de correlação. Explicitamente estas são dadas por,

$$\begin{split} G^{<}_{aa,13}(\omega) &= [G^{r}_{aa,31}]^{*} \left(G^{r}_{aa,11} \Sigma^{<}_{Ta,11} + G^{r}_{aa,12} \Sigma^{<}_{Ta,21} + G^{r}_{aa,13} \Sigma^{<}_{Ta,31} + G^{r}_{aa,14} \Sigma^{<}_{Ta,41} \right) + \\ &+ [G^{r}_{aa,32}]^{*} \left(G^{r}_{aa,11} \Sigma^{<}_{Ta,12} + G^{r}_{aa,12} \Sigma^{<}_{Ta,22} + G^{r}_{aa,13} \Sigma^{<}_{Ta,32} + G^{r}_{aa,14} \Sigma^{<}_{Ta,42} \right) + \\ &+ [G^{r}_{aa,33}]^{*} \left(G^{r}_{aa,11} \Sigma^{<}_{Ta,13} + G^{r}_{aa,12} \Sigma^{<}_{Ta,23} + G^{r}_{aa,13} \Sigma^{<}_{Ta,33} + G^{r}_{aa,14} \Sigma^{<}_{Ta,43} \right) + \\ &+ [G^{r}_{aa,34}]^{*} \left(G^{r}_{aa,11} \Sigma^{<}_{Ta,14} + G^{r}_{aa,12} \Sigma^{<}_{Ta,24} + G^{r}_{aa,13} \Sigma^{<}_{Ta,34} + G^{r}_{aa,14} \Sigma^{<}_{Ta,44} \right) \end{split}$$

e a componente 31 pode ser escrita na forma,

$$\begin{split} G^{<}_{aa,31}(\omega) &= [G^{r}_{aa,11}]^{*} \left(G^{r}_{aa,31} \Sigma^{<}_{Ta,11} + G^{r}_{aa,32} \Sigma^{<}_{Ta,21} + G^{r}_{aa,33} \Sigma^{<}_{Ta,31} + G^{r}_{aa,34} \Sigma^{<}_{Ta,41} \right) + \\ &+ [G^{r}_{aa,12}]^{*} \left(G^{r}_{aa,31} \Sigma^{<}_{Ta,12} + G^{r}_{aa,32} \Sigma^{<}_{Ta,22} + G^{r}_{aa,33} \Sigma^{<}_{Ta,32} + G^{r}_{aa,34} \Sigma^{<}_{Ta,42} \right) + \\ &+ [G^{r}_{aa,13}]^{*} \left(G^{r}_{aa,31} \Sigma^{<}_{Ta,13} + G^{r}_{aa,32} \Sigma^{<}_{Ta,23} + G^{r}_{aa,33} \Sigma^{<}_{Ta,33} + G^{r}_{aa,34} \Sigma^{<}_{Ta,43} \right) + \\ &+ [G^{r}_{aa,14}]^{*} \left(G^{r}_{aa,31} \Sigma^{<}_{Ta,14} + G^{r}_{aa,32} \Sigma^{<}_{Ta,24} + G^{r}_{aa,33} \Sigma^{<}_{Ta,34} + G^{r}_{aa,34} \Sigma^{<}_{Ta,44} \right). \end{split}$$

Os elementos de matriz da auto-energia Σ_{Ta} são dados pelas equações (E.1.6) usadas no cálculo

da corrente I_1 . Substituindo estes elementos de matriz nas expressões $G_{aa,13}^<$ e $G_{aa,31}^<$, tem-se que,

$$\begin{split} G_{aa,13}^{<} &- [G_{aa,31}^{<}]^{*} = if \tilde{\rho} \Gamma_{s} \times \left\{ \left([G_{aa,31}^{r}]^{*} \left(X_{12}^{-} + [X_{12}^{-}]^{*} \right) - 2[G_{aa,32}^{r}]^{*} Z_{12}^{-} \right) G_{aa,11}^{r} \right. \\ &+ G_{aa,12}^{r} \left([G_{aa,32}^{r}]^{*} \left(Y_{21}^{-} + [Y_{21}^{-}]^{*} \right) - 2[G_{aa,31}^{r}]^{*} [Z_{12}^{-}]^{*} \right) + \\ &+ G_{aa,14}^{r} \left([G_{aa,34}^{r}]^{*} \left(Y_{43}^{+} + [Y_{43}^{+}]^{*} \right) - 2[G_{aa,33}^{r}]^{*} [Z_{34}^{+}]^{*} \right) \\ &+ G_{aa,13}^{r} \left([G_{aa,33}^{r}]^{*} \left(X_{34}^{+} + [X_{34}^{+}]^{*} \right) - 2[G_{aa,34}^{r}]^{*} Z_{34}^{+} \right) \right\} + \\ &+ 2i \left\{ f_{1} \left(G_{aa,11}^{r} \Gamma_{1\uparrow} [G_{aa,31}^{r}]^{*} + G_{aa,13}^{r} [G_{aa,33}^{r}]^{*} \Gamma_{1\downarrow} \right) + \bar{f}_{1} \left(G_{aa,12}^{r} \Gamma_{1\downarrow} [G_{aa,32}^{r}]^{*} + G_{aa,14}^{r} [G_{aa,34}^{r}]^{*} \Gamma_{1\uparrow} \right) \right\} \\ &+ 2i \left\{ f_{2} \left\{ \left([G_{aa,32}^{r}]^{*} \left(\Gamma_{2\downarrow} c^{2} + s^{2} \Gamma_{2\uparrow} \right) - cs [G_{aa,34}^{r}]^{*} \left(\Gamma_{2\downarrow} - \Gamma_{2\uparrow} \right) \right) G_{aa,12}^{r} + G_{aa,14}^{r} \left[[G_{aa,34}^{r}]^{*} \left(\Gamma_{2\downarrow} c^{2} + s^{2} \Gamma_{2\downarrow} \right) \right. \\ &- cs [G_{aa,32}^{r}]^{*} \left(\Gamma_{2\downarrow} - \Gamma_{2\uparrow} \right) \right] \right\} + 2i f_{2} \left\{ \left([G_{aa,31}^{r}]^{*} \left(\Gamma_{2\downarrow} c^{2} + s^{2} \Gamma_{2\downarrow} \right) - cs [G_{aa,33}^{r}]^{*} \left(\Gamma_{2\downarrow} - \Gamma_{2\uparrow} \right) \right) G_{aa,11}^{r} \\ &+ G_{aa,13}^{r} \left[\left(\Gamma_{2\downarrow} c^{2} + s^{2} \Gamma_{2\uparrow} \right) \left[G_{aa,33}^{r}]^{*} - cs [G_{aa,31}^{r}]^{*} \left(\Gamma_{2\downarrow} - \Gamma_{2\uparrow} \right) \right] \right\} \end{split}$$

des
de que X_{ij}^{\pm} e Y_{ij}^{\pm} são reais, conforme pode ser verificado das equações (E.1.7) e (E.1.8), então pode-se escrever,

$$\begin{split} G_{aa,13}^{<} &- [G_{aa,31}^{<}]^{*} = \\ if \rho \Gamma_{s} \left\{ \left([G_{aa,31}^{r}]^{*} 2[X_{12}^{-}] - 2[G_{aa,32}^{r}]^{*}Z_{12}^{-} \right) G_{aa,11}^{r} + G_{aa,12}^{r} \left([G_{aa,32}^{r}]^{*} 2[Y_{21}^{-}] - 2[G_{aa,31}^{r}]^{*} [Z_{12}^{-}]^{*} \right) + \\ &+ G_{aa,14}^{r} \left([G_{aa,34}^{r}]^{*} 2[Y_{43}^{+}] - 2[G_{aa,33}^{r}]^{*} [Z_{34}^{+}]^{*} \right) + G_{aa,13}^{r} \left([G_{aa,33}^{r}]^{*} 2[X_{34}^{+}] - 2[G_{aa,34}^{r}]^{*} Z_{34}^{+} \right) \right\} + \\ &+ 2i \left\{ f_{1} \left(G_{aa,11}^{r} \Gamma_{1\uparrow} [G_{aa,31}^{r}]^{*} + G_{aa,13}^{r} [G_{aa,33}^{r}]^{*} \Gamma_{1\downarrow} \right) + \bar{f}_{1} \left(G_{aa,12}^{r} \Gamma_{1\downarrow} [G_{aa,32}^{r}]^{*} + G_{aa,14}^{r} [G_{aa,34}^{r}]^{*} \Gamma_{1\uparrow} \right) \right\} \\ &+ 2i \bar{f}_{2} \left\{ \left([G_{aa,32}^{r}]^{*} \left(\Gamma_{2\downarrow} c^{2} + s^{2} \Gamma_{2\uparrow} \right) - cs [G_{aa,34}^{r}]^{*} \left(\Gamma_{2\downarrow} - \Gamma_{2\uparrow} \right) \right) G_{aa,12}^{r} + G_{aa,14}^{r} \left[[G_{aa,33}^{r}]^{*} \left(\Gamma_{2\downarrow} c^{2} + s^{2} \Gamma_{2\downarrow} \right) - cs [G_{aa,33}^{r}]^{*} \left(\Gamma_{2\downarrow} - \Gamma_{2\uparrow} \right) \right) G_{aa,11}^{r} \right. \\ &+ G_{aa,13}^{r} \left[\left(\Gamma_{2\downarrow} c^{2} + s^{2} \Gamma_{2\uparrow} \right) - cs [G_{aa,33}^{r}]^{*} \left(\Gamma_{2\downarrow} - \Gamma_{2\uparrow} \right) \right] \right\} \end{split}$$

e multiplicando por $\frac{1}{2i}$ em ambos os lados tem-se ainda,

$$\begin{split} \frac{1}{2i} \left(G_{aa,13}^{<} - [G_{aa,31}^{<}]^{*} \right) &= \\ f\tilde{\rho}\Gamma_{s} \left\{ \left([G_{aa,31}^{r}]^{*}[X_{12}^{-}] - [G_{aa,32}^{r}]^{*}Z_{12}^{-} \right) G_{aa,11}^{r} + G_{aa,12}^{r} \left([G_{aa,32}^{r}]^{*}[Y_{21}^{-}] - [G_{aa,31}^{r}]^{*}[Z_{12}^{-}]^{*} \right) + \\ &+ G_{aa,14}^{r} \left([G_{aa,34}^{r}]^{*}[Y_{43}^{+}] - [G_{aa,33}^{r}]^{*}[Z_{34}^{+}]^{*} \right) + G_{aa,13}^{r} \left([G_{aa,33}^{r}]^{*}[X_{34}^{+}] - [G_{aa,34}^{r}]^{*}Z_{34}^{+} \right) \right\} + \\ &+ f_{1} \left(G_{aa,11}^{r}\Gamma_{1\uparrow}[G_{aa,31}^{r}]^{*} + G_{aa,13}^{r}[G_{aa,33}^{r}]^{*}\Gamma_{1\downarrow} \right) + \bar{f}_{1} \left(G_{aa,12}^{r}\Gamma_{1\downarrow}[G_{aa,32}^{r}]^{*} + G_{aa,14}^{r}[G_{aa,34}^{r}]^{*}\Gamma_{1\uparrow} \right) \\ &+ \bar{f}_{2} \left\{ \left(\left(\Gamma_{2\downarrow}c^{2} + s^{2}\Gamma_{2\uparrow} \right) [G_{aa,32}^{r}]^{*} - cs[G_{aa,34}^{r}]^{*} \left(\Gamma_{2\downarrow} - \Gamma_{2\uparrow} \right) \right) G_{aa,12}^{r} + G_{aa,14}^{r} \left[\left(\Gamma_{2\uparrow}c^{2} + s^{2}\Gamma_{2\downarrow} \right) [G_{aa,34}^{r}]^{*} \right] \right) \\ &- cs[G_{aa,32}^{r}]^{*} \left(\Gamma_{2\downarrow} - \Gamma_{2\uparrow} \right) \right] \right\} + f_{2} \left\{ \left(\left(\Gamma_{2\uparrow}c^{2} + s^{2}\Gamma_{2\downarrow} \right) [G_{aa,31}^{r}]^{*} - cs[G_{aa,33}^{r}]^{*} \left(\Gamma_{2\downarrow} - \Gamma_{2\uparrow} \right) \right) G_{aa,11}^{r} \right) \\ &+ G_{aa,13}^{r} \left[\left(\Gamma_{2\downarrow}c^{2} + s^{2}\Gamma_{2\uparrow} \right) [G_{aa,33}^{r}]^{*} - cs[G_{aa,33}^{r}]^{*} \left(\Gamma_{2\downarrow} - \Gamma_{2\uparrow} \right) \right] \right\}$$
(E.2.6)

_

O próximo termo a ser determinado é a diferença $G_{aa,31}^{<} - [G_{aa,13}^{<}]^{*}$. Seguindo os mesmos passos para obter (E.2.6) pode-se escrever,

$$\frac{1}{2i} \left(G_{aa,31}^{<} - [G_{aa,13}^{<}]^{*} \right) = f \tilde{\rho} \Gamma_{s} \times \\
\left\{ \left(G_{aa,31}^{r} - [X_{12}^{-}] - G_{aa,32}^{r} [Z_{12}^{-}]^{*} \right) [G_{aa,11}^{r}]^{*} + [G_{aa,13}^{r}]^{*} \left(G_{aa,33}^{r} [X_{34}^{+}] - G_{aa,34}^{r} [Z_{34}^{+}]^{*} \right) + \\
+ [G_{aa,12}^{r}]^{*} \left(G_{aa,32}^{r} [Y_{21}^{-}] - G_{aa,31}^{r} Z_{12}^{-} \right) + [G_{aa,14}^{r}]^{*} \left(G_{aa,34}^{r} [Y_{43}^{+}] - G_{aa,33}^{r} Z_{34}^{+} \right) \right\} + \\
+ f_{1} \left(G_{aa,31}^{r} \Gamma_{1\uparrow} [G_{aa,11}^{r}]^{*} + [G_{aa,13}^{r}]^{*} G_{aa,33}^{r} \Gamma_{1\downarrow} \right) + \bar{f}_{1} \left(G_{aa,32}^{r} \Gamma_{1\downarrow} [G_{aa,12}^{r}]^{*} + [G_{aa,14}^{r}]^{*} G_{aa,34}^{r} \Gamma_{1\uparrow} \right) + \\
+ \bar{f}_{2} \left\{ \left(G_{aa,32}^{r} \left(\Gamma_{2\downarrow} c^{2} + s^{2} \Gamma_{2\uparrow} \right) - cs G_{aa,34}^{r} \left(\Gamma_{2\downarrow} - \Gamma_{2\uparrow} \right) \right) [G_{aa,12}^{r}]^{*} + [G_{aa,14}^{r}]^{*} \left(G_{aa,34}^{r} \left(\Gamma_{2\uparrow} c^{2} + s^{2} \Gamma_{2\downarrow} \right) - cs G_{aa,33}^{r} \left(\Gamma_{2\downarrow} - \Gamma_{2\uparrow} \right) \right) [G_{aa,11}^{r}]^{*} \\
+ [G_{aa,13}^{r}]^{*} \left(G_{aa,33}^{r} \left(\Gamma_{2\downarrow} c^{2} + s^{2} \Gamma_{2\downarrow} \right) - cs G_{aa,31}^{r} \left(\Gamma_{2\downarrow} - \Gamma_{2\uparrow} \right) \right) \right\}$$
(E.2.7)

Somando (E.2.6) e (E.2.7) tem-se que,

$$\frac{i}{2}cs\left(\Gamma_{2\uparrow} - \Gamma_{2\downarrow}\right)\left[G_{aa,13}^{<} - [G_{aa,13}^{<}]^{*} + G_{aa,31}^{<} - [G_{aa,31}^{<}]^{*}\right] = -A_{s}f - A_{1}f_{1} - B_{1}\bar{f}_{1} - A_{2}f_{2} - B_{2}\bar{f}_{2}$$
(E.2.8)

onde foram usadas as seguintes definições:

$$\begin{split} A_{s} &= cs\tilde{\rho}\Gamma_{s}\left(\Gamma_{2\uparrow} - \Gamma_{2\downarrow}\right) \times \\ & \left\{ \left(G_{aa,31}^{r}[G_{aa,11}^{r}]^{*} + [G_{aa,31}^{r}]^{*}G_{aa,11}^{r}\right)X_{12}^{-} + \left(G_{aa,33}^{r}[G_{aa,13}^{r}]^{*} + [G_{aa,33}^{r}]^{*}G_{aa,13}^{r}\right)X_{34}^{+} + \\ \left(G_{aa,32}^{r}[G_{aa,12}^{r}]^{*} + [G_{aa,32}^{r}]^{*}G_{aa,12}^{r}\right)Y_{21}^{-} + \left(G_{aa,34}^{r}[G_{aa,14}^{r}]^{*} + [G_{aa,34}^{r}]^{*}G_{aa,14}^{r}\right)Y_{43}^{+} - \left(G_{aa,32}^{r}[G_{aa,11}^{r}]^{*} + G_{aa,12}^{r}[G_{aa,31}^{r}]^{*}\right)[Z_{12}^{-}]^{*} - \left(G_{aa,31}^{r}[G_{aa,12}^{r}]^{*} + G_{aa,11}^{r}[G_{aa,32}^{r}]^{*}\right)Z_{12}^{-} \\ & - \left(G_{aa,34}^{r}[G_{aa,13}^{r}]^{*} + G_{aa,14}^{r}[G_{aa,33}^{r}]^{*}\right)[Z_{34}^{+}]^{*} - \left(G_{aa,33}^{r}[G_{aa,14}^{r}]^{*} + G_{aa,13}^{r}[G_{aa,34}^{r}]^{*}\right)Z_{34}^{+}\right\} \quad (E.2.9a) \end{split}$$

$$A_{1} = cs \left(\Gamma_{2\uparrow} - \Gamma_{2\downarrow}\right) \times \left\{ \left(G_{aa,33}^{r} [G_{aa,13}^{r}]^{*} + [G_{aa,33}^{r}]^{*} G_{aa,13}^{r}\right) \Gamma_{1\downarrow} + \left(G_{aa,31}^{r} [G_{aa,11}^{r}]^{*} + [G_{aa,31}^{r}]^{*} G_{aa,11}^{r}\right) \Gamma_{1\uparrow} \right\}$$
(E.2.9b)

$$B_{1} = cs \left(\Gamma_{2\uparrow} - \Gamma_{2\downarrow}\right) \times \left\{ \left(G_{aa,32}^{r} [G_{aa,12}^{r}]^{*} + [G_{aa,32}^{r}]^{*} G_{aa,12}^{r}\right) \Gamma_{1\downarrow} + \left(G_{aa,34}^{r} [G_{aa,14}^{r}]^{*} + [G_{aa,34}^{r}]^{*} G_{aa,14}^{r}\right) \Gamma_{1\uparrow} \right\} \quad (E.2.9c)$$

$$A_{2} = cs \left(\Gamma_{2\uparrow} - \Gamma_{2\downarrow}\right) \left\{ \left(G_{aa,31}^{r} \left(\Gamma_{2\uparrow} c^{2} + s^{2} \Gamma_{2\downarrow} \right) - cs G_{aa,33}^{r} \left(\Gamma_{2\downarrow} - \Gamma_{2\uparrow} \right) \right) \left[G_{aa,11}^{r} \right]^{*} + \left(\left[G_{aa,31}^{r} \right]^{*} \left(\Gamma_{2\uparrow} c^{2} + s^{2} \Gamma_{2\downarrow} \right) - cs \left[G_{aa,33}^{r} \right]^{*} \left(\Gamma_{2\downarrow} - \Gamma_{2u} \right) \right) G_{aa,11}^{r} + G_{aa,13}^{r} \left(\left[G_{aa,33}^{r} \right]^{*} \left(\Gamma_{2\downarrow} c^{2} + s^{2} \Gamma_{2\uparrow} \right) - cs \left[G_{aa,33}^{r} \right]^{*} \left(\Gamma_{2\downarrow} c^{2} + s^{2} \Gamma_{2\uparrow} \right) \right) \right\} \\ - cs \left[G_{aa,31}^{r} \right]^{*} \left(\Gamma_{2\downarrow} - \Gamma_{2\uparrow} \right) \right) + \left[G_{aa,13}^{r} \right]^{*} \left(G_{aa,33}^{r} \left(\Gamma_{2\downarrow} c^{2} + s^{2} \Gamma_{2\uparrow} \right) - cs G_{aa,31}^{r} \left(\Gamma_{2\downarrow} - \Gamma_{2\uparrow} \right) \right) \right\} \quad (E.2.9d)$$

$$B_{2} = cs \left(\Gamma_{2\uparrow} - \Gamma_{2\downarrow}\right) \left\{ \left(G_{aa,32}^{r} \left(\Gamma_{2\downarrow}c^{2} + s^{2}\Gamma_{2\uparrow}\right) - csG_{aa,34}^{r} \left(\Gamma_{2\downarrow} - \Gamma_{2\uparrow}\right)\right) \left[G_{aa,12}^{r}\right]^{*} + \left(\left[G_{aa,32}^{r}\right]^{*} \left(\Gamma_{2\downarrow}c^{2} + s^{2}\Gamma_{2\uparrow}\right) - cs\left[G_{aa,34}^{r}\right]^{*} \left(\Gamma_{2\downarrow} - \Gamma_{2\uparrow}\right)\right) G_{aa,12}^{r} + G_{aa,14}^{r} \left(\left[G_{aa,34}^{r}\right]^{*} \left(\Gamma_{2\downarrow}c^{2} + s^{2}\Gamma_{2\downarrow}\right) - cs\left[G_{aa,34}^{r}\right]^{*} \left(\Gamma_{2\downarrow}c^{2} + s^{2}\Gamma_{2\downarrow}\right) - cs\left[G_{aa,32}^{r}\right]^{*} \left(\Gamma_{2\downarrow} - \Gamma_{2\uparrow}\right)\right) + \left[G_{aa,14}^{r}\right]^{*} \left(G_{aa,34}^{r} \left(\Gamma_{2\uparrow}c^{2} + s^{2}\Gamma_{2\downarrow}\right) - csG_{aa,32}^{r} \left(\Gamma_{2\downarrow} - \Gamma_{2\uparrow}\right)\right)\right\} \quad (E.2.9e)$$

O próximos termos a serem calculados são dados abaixo,

$$icsf_{2}(\Gamma_{2\uparrow} - \Gamma_{2\downarrow}) \left[G_{aa,13}^{r} - [G_{aa,13}^{r}]^{*} + G_{aa,31}^{r} - [G_{aa,31}^{r}]^{*} \right] = icsf_{2}(\Gamma_{2\uparrow} - \Gamma_{2\downarrow}) \left(G_{aa,13}^{r} - [G_{aa,13}^{r}]^{*} \right) + icsf_{2}(\Gamma_{2\uparrow} - \Gamma_{2\downarrow}) \left(G_{aa,31}^{r} - [G_{aa,13}^{r}]^{*} \right)$$

e usando o fato de que as funções de Green avançada e retardada estão relacionadas por, $\mathbf{G}^r = [\mathbf{G}^a]^{\dagger}$, pode-se escrever ainda,

$$icsf_{2}\left(\Gamma_{2\uparrow} - \Gamma_{2\downarrow}\right) \left[G_{aa,13}^{r} - [G_{aa,13}^{r}]^{*} + G_{aa,31}^{r} - [G_{aa,31}^{r}]^{*}\right] = icsf_{2}\left(\Gamma_{2\uparrow} - \Gamma_{2\downarrow}\right) \left(G_{aa,13}^{r} - G_{aa,13}^{a}\right) + icsf_{2}\left(\Gamma_{2\uparrow} - \Gamma_{2\downarrow}\right) \left(G_{aa,31}^{r} - G_{aa,31}^{a}\right) \quad (E.2.10)$$

e usando (E.1.18),

$$\mathbf{G}^a_{aa} - \mathbf{G}^r_{aa} = \mathbf{G}^r_{aa} \boldsymbol{\Gamma}_{Ta} \mathbf{G}^a_{aa},$$

a equação (E.2.10) pode ser escrita da seguinte forma,

$$icsf_{2}(\Gamma_{2\uparrow} - \Gamma_{2\downarrow}) \left[G_{aa,13}^{r} - [G_{aa,13}^{r}]^{*} + G_{aa,31}^{r} - [G_{aa,31}^{r}]^{*} \right] = -icsf_{2}(\Gamma_{2\uparrow} - \Gamma_{2\downarrow}) \left\{ [\mathbf{G}_{aa}^{r} \mathbf{\Gamma}_{Ta} \mathbf{G}_{aa}^{a}]_{13} + [\mathbf{G}_{aa}^{r} \mathbf{\Gamma}_{Ta} \mathbf{G}_{aa}^{a}]_{31} \right\}$$

e substituindo os elementos de matriz de Γ_{Ta} segue que,

$$\begin{split} icsf_{2}\left(\Gamma_{2\uparrow}-\Gamma_{2\downarrow}\right)\left[G_{aa,13}^{r}-[G_{aa,13}^{r}]^{*}+G_{aa,31}^{r}-[G_{aa,31}^{r}]^{*}\right] = \\ &= -icsf_{2}\left(\Gamma_{2\uparrow}-\Gamma_{2\downarrow}\right)\left\{-i\left\{\tilde{\rho}\Gamma_{s}\left\{\left(-G_{aa,31}^{r}[G_{aa,11}]^{*}-[G_{aa,31}^{r}]^{*}G_{aa,11}^{r}\right)X_{12}^{-}+\right.\\ \left(-G_{aa,33}^{r}[G_{aa,13}]^{*}-[G_{aa,33}^{r}]^{*}G_{aa,13}^{r}\right)X_{34}^{+}+\left(-G_{aa,32}^{r}[G_{aa,12}]^{*}-[G_{aa,32}^{r}]^{*}G_{aa,12}^{r}\right)Y_{21}^{-}+\right.\\ \left(-G_{aa,34}^{r}[G_{aa,14}]^{*}-[G_{aa,34}^{r}]^{*}G_{aa,14}^{r}\right)Y_{43}^{+}+\right.\\ \left(G_{aa,32}^{r}[G_{aa,11}]^{*}+G_{aa,12}^{r}[G_{aa,31}]^{*}\right)\left[Z_{12}^{-}\right]^{*}+\left(G_{aa,34}^{r}[G_{aa,13}]^{*}+G_{aa,14}^{r}[G_{aa,33}]^{*}\right)\left[Z_{34}^{+}\right]^{*}+\\ \left(G_{aa,31}^{r}[G_{aa,12}]^{*}+G_{aa,11}^{r}[G_{aa,32}]^{*}\right)Z_{12}^{-}+\left(G_{aa,33}^{r}[G_{aa,14}]^{*}+G_{aa,13}^{r}[G_{aa,33}]^{*}\right)Z_{34}^{+}\right\}-\\ \left.-\left(G_{aa,31}^{r}[G_{aa,34}]^{*}+[G_{aa,11}]^{*}G_{aa,34}^{r}\right)\Gamma_{1\uparrow}-\left(G_{aa,32}^{r}[G_{aa,12}]^{*}+[G_{aa,33}^{r}]^{*}G_{aa,34}^{r}\right)Z_{34}^{+}\right\}-\\ \left.-\left(G_{aa,31}^{r}[G_{aa,34}]^{*}+[G_{aa,31}]^{*}G_{aa,34}^{r}\right)\Gamma_{1\uparrow}-\left(G_{aa,33}^{r}[G_{aa,31}]^{*}+[G_{aa,33}^{r}]^{*}G_{aa,34}^{r}\right)\Gamma_{1\downarrow}\right)\Gamma_{1\uparrow}\right]\\ \left.-\left(G_{aa,31}^{r}[G_{aa,11}]^{*}+[G_{aa,31}]^{*}G_{aa,34}^{r}\right)\Gamma_{1\uparrow}-\left(G_{aa,32}^{r}[G_{aa,33}]^{*}+[G_{aa,33}^{r}]^{*}G_{aa,33}^{r}\right)\Gamma_{1\downarrow}\right)\Gamma_{1\uparrow}\right]\\ \left.+\left(G_{aa,31}^{r}[G_{aa,31}]^{*}\left[C_{2}G_{aa,32}^{r}\right]^{*}\left(\Gamma_{2\downarrow}-\Gamma_{2\uparrow}\right)-G_{aa,34}^{r}\left(\Gamma_{2\uparrow}c^{2}+s^{2}\Gamma_{2\downarrow}\right)\right]\right]\right)\right\}\\ \left.+\left[G_{aa,12}^{r}\left[csG_{aa,34}^{r}\left(\Gamma_{2\downarrow}-\Gamma_{2\uparrow}\right)-G_{aa,33}^{r}\left(\Gamma_{2\downarrow}c^{2}+s^{2}\Gamma_{2\downarrow}\right)\right]\right]\\ \left.+\left[G_{aa,13}^{r}\left[csG_{aa,33}^{r}\left(\Gamma_{2\downarrow}-\Gamma_{2\uparrow}\right)-G_{aa,33}^{r}\left(\Gamma_{2\downarrow}c^{2}+s^{2}\Gamma_{2\uparrow}\right)\right]\right]\right)\right]\\ \left.+\left[G_{aa,13}^{r}\left[csG_{aa,33}^{r}\left(\Gamma_{2\downarrow}-\Gamma_{2\uparrow}\right)-G_{aa,33}^{r}\left(\Gamma_{2\downarrow}c^{2}+s^{2}\Gamma_{2\downarrow}\right)\right]\right]\\ \left.+\left[G_{aa,11}^{r}\left[csG_{aa,33}^{r}\left(\Gamma_{2\downarrow}-\Gamma_{2\uparrow}\right)-G_{aa,33}^{r}\left(\Gamma_{2\downarrow}c^{2}+s^{2}\Gamma_{2\downarrow}\right)\right]\right]\right\}$$

e comparando os termos desta equação com as definições dadas pelas equações (E.2.9) pode-se escrever;

$$icsf_{2}(\Gamma_{2\uparrow} - \Gamma_{2\downarrow}) \left[G_{aa,13}^{r} - [G_{aa,13}^{r}]^{*} + G_{aa,31}^{r} - [G_{aa,31}^{r}]^{*} \right] = -if_{2} \left\{ -i \left\{ -A_{s} - A_{1} - B_{1} - A_{2} - B_{2} \right\} \right\}$$

ou ainda,

$$icsf_{2} (\Gamma_{2\uparrow} - \Gamma_{2\downarrow}) \left[G^{r}_{aa,13} - [G^{r}_{aa,13}]^{*} + G^{r}_{aa,31} - [G^{r}_{aa,31}]^{*} \right]$$
$$= f_{2}(A_{s} + A_{1} + B_{1} + A_{2} + B_{2}). \quad (E.2.11)$$

Combinando as equações (E.2.8) e (E.2.11), tem-se que,

$$\frac{i}{2}cs\left(\Gamma_{2\uparrow} - \Gamma_{2\downarrow}\right) \left[G_{aa,13}^{<} - [G_{aa,13}^{<}]^{*} + G_{aa,31}^{<} - [G_{aa,31}^{<}]^{*}\right] + icsf_{2}\left(\Gamma_{2\uparrow} - \Gamma_{2\downarrow}\right) \left[G_{aa,13}^{r} - [G_{aa,13}^{r}]^{*} + G_{aa,31}^{r} - [G_{aa,31}^{r}]^{*}\right] = A_{s}(f_{2} - f_{s}) + A_{1}(f_{2} - f_{1}) + B_{1}(f_{2} - \bar{f}_{1}) + B_{2}(f_{2} - \bar{f}_{2}). \quad (E.2.12)$$

O próximo passo é determinar os elementos de matriz diagonais. Aplicando os mesmos procedimentos realizados nos cálculos dos elementos não diagonais o termo $\frac{1}{2i} \left(G_{aa,11}^{<} - [G_{aa,11}^{<}]^{*} \right)$ pode ser escrito da seguinte forma,

$$\begin{split} \frac{1}{2i} \left(G_{aa,11}^{<} - [G_{aa,11}^{<}]^{*} \right) = \\ f_{1} \left(\Gamma_{1\uparrow} |G_{aa,11}^{r}|^{2} + |G_{aa,13}^{r}|^{2} \Gamma_{1\downarrow} \right) + \bar{f}_{1} \left(\Gamma_{1\downarrow} |G_{aa,12}^{r}|^{2} + |G_{aa,14}^{r}|^{2} \Gamma_{1\uparrow} \right) + \bar{f}_{2} \left\{ csG_{aa,14}^{r} \left(\Gamma_{2\uparrow} - \Gamma_{2\downarrow} \right) [G_{aa,12}^{r}]^{*} + cs[G_{aa,12}^{r}]^{*} \left(\Gamma_{2\uparrow} - \Gamma_{2\downarrow} \right) G_{aa,12}^{r} + \left(\Gamma_{2\downarrow}c^{2} + s^{2}\Gamma_{2\uparrow} \right) |G_{aa,12}^{r}|^{2} + |G_{aa,14}^{r}|^{2} \left(\Gamma_{2\uparrow}c^{2} + s^{2}\Gamma_{2\downarrow} \right) \right\} + \\ + f_{2} \left\{ csG_{aa,13}^{r} \left(\Gamma_{2\uparrow} - \Gamma_{2\downarrow} \right) [G_{aa,11}^{r}]^{*} + cs[G_{aa,13}^{r}]^{*} \left(\Gamma_{2\uparrow} - \Gamma_{2\downarrow} \right) G_{aa,11}^{r} + \left(\Gamma_{2\uparrow}c^{2} + s^{2}\Gamma_{2\downarrow} \right) |G_{aa,11}^{r}|^{2} \\ + |G_{aa,13}^{r}|^{2} \left(\Gamma_{2\downarrow}c^{2} + s^{2}\Gamma_{2\uparrow} \right) \right\} + f\rho\Gamma_{s} \left\{ -G_{aa,12}^{r}[Z_{12}^{-}]^{*}[G_{aa,11}^{r}]^{*} - [G_{aa,12}^{r}]^{*}Z_{12}^{-}G_{aa,11}^{r} + X_{12}^{-}|G_{aa,11}^{r}|^{2} \\ + |G_{aa,13}^{r}|^{2}X_{34}^{+} + |G_{aa,12}^{r}|^{2}Y_{21}^{-} + |G_{aa,14}^{r}|^{2}Y_{43}^{+} - [G_{aa,13}^{r}]^{*}G_{aa,14}^{r}[Z_{34}^{+}]^{*} - G_{aa,13}^{r}[G_{aa,14}^{r}]^{*}Z_{34}^{+} \right\} \end{split}$$

e o termo $\frac{1}{2i} \left(G^{<}_{aa,33} - [G^{<}_{aa,33}]^* \right)$ é dado por,

$$\begin{split} &\frac{1}{2i} \left(G_{aa,33}^{<} - [G_{aa,33}^{<}]^{*} \right) = \\ &f_{1} \left(\Gamma_{1\uparrow} |G_{aa,31}^{r}|^{2} + |G_{aa,33}^{r}|^{2} \Gamma_{1\downarrow} \right) + \bar{f}_{1} \left(\Gamma_{1\downarrow} |G_{aa,32}^{r}|^{2} + |G_{aa,34}^{r}|^{2} \Gamma_{1\uparrow} \right) + \bar{f}_{2} \left\{ csG_{aa,34}^{r} \left(\Gamma_{2\uparrow} - \Gamma_{2\downarrow} \right) [G_{aa,32}^{r}]^{*} \\ &+ cs[G_{aa,34}^{r}]^{*} \left(\Gamma_{2\uparrow} - \Gamma_{2\downarrow} \right) G_{aa,32}^{r} + \left(\Gamma_{2\downarrow}c^{2} + s^{2}\Gamma_{2\uparrow} \right) |G_{aa,32}^{r}|^{2} + |G_{aa,34}^{r}|^{2} \left(\Gamma_{2\uparrow}c^{2} + s^{2}\Gamma_{2\downarrow} \right) \right\} + \\ &+ f_{2} \left\{ csG_{aa,33}^{r} \left(\Gamma_{2\uparrow} - \Gamma_{2\downarrow} \right) [G_{aa,31}^{r}]^{*} + cs[G_{aa,33}^{r}]^{*} \left(\Gamma_{2\uparrow} - \Gamma_{2\downarrow} \right) G_{aa,31}^{r} + \left(\Gamma_{2\uparrow}c^{2} + s^{2}\Gamma_{2\downarrow} \right) |G_{aa,31}^{r}|^{2} \\ &+ |G_{aa,33}^{r}|^{2} \left(\Gamma_{2\downarrow}c^{2} + s^{2}\Gamma_{2\uparrow} \right) \right\} + f\tilde{\rho}\Gamma_{s} \left\{ -G_{aa,32}^{r}[Z_{12}^{-}]^{*}[G_{aa,31}^{r}]^{*} - [G_{aa,32}^{r}]^{*}Z_{12}^{-}G_{aa,31}^{r} + X_{12}^{-}[G_{aa,31}^{r}]^{2} \\ &+ |G_{aa,33}^{r}|^{2}X_{34}^{-} + |G_{aa,32}^{r}|^{2}Y_{21}^{-} + |G_{aa,34}^{r}|^{2}Y_{43}^{+} - [G_{aa,33}^{r}]^{*}G_{aa,34}^{r}[Z_{34}^{+}]^{*} - G_{aa,33}^{r}[G_{aa,34}^{r}]^{*}Z_{34}^{+} \right\} \end{split}$$

Combinando as duas últimas equações segue que,

$$\begin{split} &-\frac{i}{2} \left(G_{aa,11}^{<} - [G_{aa,11}^{<}]^{*}\right) \left(c^{2}\Gamma_{2\uparrow} + s^{2}\Gamma_{2\downarrow}\right) - \frac{i}{2} \left(G_{aa,33}^{<} - [G_{aa,33}^{<}]^{*}\right) \left(c^{2}\Gamma_{2\downarrow} + s^{2}\Gamma_{2\uparrow}\right) = \\ &= \left(c^{2}\Gamma_{2\uparrow} + s^{2}\Gamma_{2\downarrow}\right) \left\{f_{1} \left(\Gamma_{1\uparrow}|G_{aa,11}^{r}|^{2} + |G_{aa,13}^{r}|^{2}\Gamma_{1\downarrow}\right) + \bar{f}_{1} \left(\Gamma_{1\downarrow}|G_{aa,12}^{r}|^{2} + |G_{aa,14}^{r}|^{2}\Gamma_{1\uparrow}\right) + \\ &+ \bar{f}_{2} \left\{csG_{aa,14}^{r} \left(\Gamma_{2\uparrow} - \Gamma_{2\downarrow}\right) \left[G_{aa,12}^{r}\right]^{*} + cs[G_{aa,14}^{r}|^{*} \left(\Gamma_{2\uparrow} - \Gamma_{2\downarrow}\right) G_{aa,12}^{r}\right] + \left(\Gamma_{2\downarrow}c^{2} + s^{2}\Gamma_{2\uparrow}\right) \left|G_{aa,12}^{r}\right|^{2} + |G_{aa,14}^{r}|^{2} \left(\Gamma_{2\uparrow}c^{2} + s^{2}\Gamma_{2\downarrow}\right)\right| + f_{2} \left\{csG_{aa,13}^{r} \left(\Gamma_{2\uparrow} - \Gamma_{2\downarrow}\right) \left[G_{aa,11}^{r}\right]^{*} + cs[G_{aa,13}^{r}\right]^{*} \left(\Gamma_{2\uparrow} - \Gamma_{2\downarrow}\right) G_{aa,11}^{r}\right] \\ &+ \left(\Gamma_{2\uparrow}c^{2} + s^{2}\Gamma_{2\downarrow}\right)\right| + f_{2} \left\{csG_{aa,11}^{r} \left(\Gamma_{2\uparrow} - \Gamma_{2\downarrow}\right) \left[G_{aa,11}^{r}\right]^{*} + cs[G_{aa,13}^{r}\right]^{2} \left(\Gamma_{2\downarrow}c^{2} + s^{2}\Gamma_{2\uparrow}\right)\right\} + \\ &+ f\tilde{\rho}\Gamma_{s} \left\{-G_{aa,12}^{r}\left[Z_{12}^{-1}\right]^{*}\left[G_{aa,11}^{r}\right]^{*} - \left[G_{aa,12}^{r}\right]^{*}Z_{12}^{-2}G_{aa,11}^{r} + X_{12}^{-2}\left[G_{aa,11}^{r}\right]^{2} + \left[G_{aa,13}^{r}\right]^{2}X_{34}^{*} + \left[G_{aa,12}^{r}\right]^{2}Y_{21}^{*} + \\ &+ \left|G_{aa,14}^{r}\right|^{2}Y_{43}^{+} - \left[G_{aa,13}^{r}\right]^{*}G_{aa,14}^{r}\left[Z_{34}^{+}\right]^{*} - G_{aa,13}^{r}\left[G_{aa,14}^{r}\right]^{*}Z_{34}^{*}\right\} + \left(c^{2}\Gamma_{2\downarrow} + s^{2}\Gamma_{2\uparrow}\right) \left\{f_{1} \left(\Gamma_{1\uparrow}|G_{aa,31}^{r}\right|^{2} + \\ &+ \left|G_{aa,33}^{r}\right|^{2}\Gamma_{1\downarrow}\right) + \bar{f}_{1} \left(\Gamma_{1\downarrow}|G_{aa,32}^{r}\right|^{2} + \left|G_{aa,34}^{r}\right|^{2}\Gamma_{1\uparrow}\right) + \bar{f}_{2} \left\{csG_{aa,34}^{r}\left(\Gamma_{2\uparrow} - \Gamma_{2\downarrow}\right) \left[G_{aa,31}^{r}\right]^{2} + \\ &+ f_{2} \left\{csG_{aa,33}^{r}\left(\Gamma_{2\uparrow} - \Gamma_{2\downarrow}\right) \left[G_{aa,31}^{r}\right]^{*} + cs\left[G_{aa,33}^{r}\right]^{*} \left(\Gamma_{2\uparrow} - \Gamma_{2\downarrow}\right) \left[G_{aa,31}^{r}\right]^{*} + cs\left[G_{aa,33}^{r}\right]^{*} \left(\Gamma_{2\uparrow} c^{2} + s^{2}\Gamma_{2\downarrow}\right)\right] \left|G_{aa,31}^{r}\right|^{2} \\ &+ \left|G_{aa,33}^{r}\right|^{2} \left(\Gamma_{2\downarrow}c^{2} + s^{2}\Gamma_{2\uparrow}\right)\right] + f\tilde{\rho}\tilde{\rho}s\left\{-G_{aa,32}^{r}\left[G_{aa,33}^{r}\right]^{*} \left(\Gamma_{2\uparrow} c^{2} + s^{2}\Gamma_{2\downarrow}\right)\right] \left|G_{aa,31}^{r}\right|^{2} \\ &+ \left|G_{aa,33}^{r}\right|^{2} \left(\Gamma_{2\downarrow}c^{2} + s^{2}\Gamma_{2\uparrow}\right)\right\} + f\tilde{\rho}\tilde{\rho}s\left\{-G_{aa,32}^{r}\left[G_{aa,33}^{r}\right]^{*} \left[G_{aa,33}^{r}\right]^{*} \left(G_{aa,33}^{r}\right]^{*} \left[G_{aa,33}^{r}\right]^{*$$

e usando as definições,

$$\tilde{A}_{1} = \left(c^{2}\Gamma_{2\uparrow} + s^{2}\Gamma_{2\downarrow}\right) \left(|G_{aa,11}^{r}|^{2}\Gamma_{1\uparrow} + |G_{aa,13}^{r}|^{2}\Gamma_{1\downarrow}\right) + \left(c^{2}\Gamma_{2\downarrow} + s^{2}\Gamma_{2\uparrow}\right) \left(|G_{aa,31}^{r}|^{2}\Gamma_{1\uparrow} + |G_{aa,33}^{r}|^{2}\Gamma_{1\downarrow}\right)$$
(E.2.14a)

$$\tilde{B}_{1} = \left(c^{2}\Gamma_{2\uparrow} + s^{2}\Gamma_{2\downarrow}\right) \left(|G_{aa,14}^{r}|^{2}\Gamma_{1\uparrow} + |G_{aa,12}^{r}|^{2}\Gamma_{1\downarrow}\right) + \left(c^{2}\Gamma_{2\downarrow} + s^{2}\Gamma_{2\uparrow}\right) \left(|G_{aa,34}^{r}|^{2}\Gamma_{1\uparrow} + |G_{aa,32}^{r}|^{2}\Gamma_{1\downarrow}\right)$$
(E.2.14b)

$$\begin{split} \tilde{B}_{2} &= \left(c^{2}\Gamma_{2\uparrow} + s^{2}\Gamma_{2\downarrow}\right) \times \\ &\left\{ (c^{2}\Gamma_{2\uparrow} + s^{2}\Gamma_{2\downarrow}) |G_{aa,14}^{r}|^{2} + (s^{2}\Gamma_{2\uparrow} + c^{2}\Gamma_{2\downarrow}) |G_{aa,12}^{r}|^{2} + sc(\Gamma_{2\uparrow} - \Gamma_{2\downarrow}) [G_{aa,12}^{r}]^{*}G_{aa,14}^{r} + \\ &+ sc(\Gamma_{2\uparrow} - \Gamma_{2\downarrow}) [G_{aa,14}^{r}]^{*}G_{aa,12}^{r}\right\} + \left(c^{2}\Gamma_{2\downarrow} + s^{2}\Gamma_{2\uparrow}\right) \left\{ (c^{2}\Gamma_{2\uparrow} + s^{2}\Gamma_{2\downarrow}) |G_{aa,34}^{r}|^{2} + (s^{2}\Gamma_{2\uparrow} + c^{2}\Gamma_{2\downarrow}) |G_{aa,32}^{r}|^{2} \\ &+ sc(\Gamma_{2\uparrow} - \Gamma_{2\downarrow}) [G_{aa,32}^{r}]^{*}G_{aa,34}^{r} + sc(\Gamma_{2\uparrow} - \Gamma_{2\downarrow}) [G_{aa,34}^{r}]^{*}G_{aa,32}^{r}\right\} \quad (E.2.14c) \end{split}$$

$$\begin{split} \tilde{A}_{2} &= \left(c^{2}\Gamma_{2\downarrow} + s^{2}\Gamma_{2\uparrow}\right) \times \\ &\left\{ (s^{2}\Gamma_{2\uparrow} + c^{2}\Gamma_{2\downarrow}) |G_{aa,33}^{r}|^{2} + (c^{2}\Gamma_{2\uparrow} + s^{2}\Gamma_{2\downarrow}) |G_{aa,31}^{r}|^{2} + sc(\Gamma_{2\uparrow} - \Gamma_{2\downarrow}) [G_{aa,33}^{r}]^{*}G_{aa,31}^{r} + \\ sc(\Gamma_{2\uparrow} - \Gamma_{2\downarrow}) [G_{aa,31}^{r}]^{*}G_{aa,33}^{r}\right\} + \left(c^{2}\Gamma_{2\uparrow} + s^{2}\Gamma_{2\downarrow}\right) \left\{ (s^{2}\Gamma_{2\uparrow} + c^{2}\Gamma_{2\downarrow}) |G_{aa,13}^{r}|^{2} + (c^{2}\Gamma_{2\uparrow} + s^{2}\Gamma_{2\downarrow}) |G_{aa,11}^{r}|^{2} \\ &+ sc(\Gamma_{2\uparrow} - \Gamma_{2\downarrow}) [G_{aa,13}^{r}]^{*}G_{aa,13}^{r} + sc(\Gamma_{2\uparrow} - \Gamma_{2\downarrow}) [G_{aa,11}^{r}]^{*}G_{aa,13}^{r}\right\} \quad (E.2.14d) \end{split}$$

$$\begin{split} \tilde{A}_{s} &= \tilde{\rho}\Gamma_{s} \times \\ \left\{ \left(c^{2}\Gamma_{2\uparrow} + s^{2}\Gamma_{2\downarrow} \right) \left\{ Y_{21}^{-} |G_{aa,12}^{r}|^{2} + X_{34}^{+} |G_{aa,13}^{r}|^{2} + Y_{43}^{+} |G_{aa,14}^{r}|^{2} + X_{12}^{-} |G_{aa,11}^{r}|^{2} - Z_{34}^{+} [G_{aa,14}^{r}]^{*} G_{aa,13}^{r} - [Z_{34}^{+}]^{*} [G_{aa,13}^{r}]^{*} G_{aa,12}^{r} \right]^{*} G_{aa,12}^{r} |S_{aa,11}^{r} - [Z_{12}^{-}]^{*} [G_{aa,11}^{r}]^{*} G_{aa,11}^{r} |S_{aa,12}^{r}]^{*} \left\{ Y_{21}^{-} |G_{aa,32}^{r}|^{2} + X_{34}^{+} |G_{aa,33}^{r}|^{2} + Y_{43}^{+} |G_{aa,34}^{r}|^{2} + X_{12}^{-} |G_{aa,31}^{r}|^{2} - Z_{34}^{+} [G_{aa,33}^{r}]^{*} G_{aa,33}^{r} - [Z_{34}^{+}]^{*} [G_{aa,33}^{r}]^{*} G_{aa,34}^{r} |S_{aa,34}^{r}|^{2} + X_{12}^{-} |G_{aa,31}^{r}|^{2} - Z_{34}^{+} [G_{aa,33}^{r}]^{*} G_{aa,33}^{r} - [Z_{34}^{+}]^{*} [G_{aa,33}^{r}]^{*} G_{aa,34}^{r} \\ - Z_{12}^{-} [G_{aa,32}^{r}]^{*} G_{aa,31}^{r} - [Z_{12}^{-}]^{*} [G_{aa,31}^{r}]^{*} G_{aa,32}^{r} \right\} \right\} \quad (E.2.14e)$$

a equação (E.2.13) pode ser escrita da seguinte maneira,

$$\frac{i}{2} \left(G_{aa,11}^{<} - \left[G_{aa,11}^{<} \right]^{*} \right) \left(c^{2} \Gamma_{2\uparrow} + s^{2} \Gamma_{2\downarrow} \right) + \frac{i}{2} \left(G_{aa,33}^{<} - \left[G_{aa,33}^{<} \right]^{*} \right) \left(c^{2} \Gamma_{2\downarrow} + s^{2} \Gamma_{2\uparrow} \right) = -\tilde{A}_{1} f_{1} - \tilde{B}_{1} \bar{f}_{1} - \tilde{A}_{2} f_{2} - \tilde{B}_{2} \bar{f}_{2} - \tilde{A}_{s} f \quad (E.2.15)$$

O próximo passo é determinar o termo;

$$if_{2}\left(G_{aa,11}^{r}-[G_{aa,11}^{r}]^{*}\right)\left(c^{2}\Gamma_{2\uparrow}+s^{2}\Gamma_{2\downarrow}\right)+if_{2}\left(G_{aa,33}^{r}-[G_{aa,33}^{r}]^{*}\right)\left(c^{2}\Gamma_{2\downarrow}+s^{2}\Gamma_{2\uparrow}\right)=\\=if_{2}\left(c^{2}\Gamma_{2\uparrow}+s^{2}\Gamma_{2\downarrow}\right)\left[\mathbf{G}_{aa}^{r}\mathbf{\Gamma}^{T}\mathbf{G}_{aa}^{a}\right]_{11}+if_{2}\left(c^{2}\Gamma_{2\downarrow}+s^{2}\Gamma_{2\uparrow}\right)\left[\mathbf{G}_{aa}^{r}\mathbf{\Gamma}^{T}\mathbf{G}_{aa}^{a}\right]_{33}$$

e usando os mesmos procedimentos adotados nos cálculos anteriores segue, após alguma álgebra, que

$$if_{2}\left(G_{aa,11}^{r} - [G_{aa,11}^{r}]^{*}\right)\left(c^{2}\Gamma_{2\uparrow} + s^{2}\Gamma_{2\downarrow}\right) + if_{2}\left(G_{aa,33}^{r} - [G_{aa,33}^{r}]^{*}\right)\left(c^{2}\Gamma_{2\downarrow} + s^{2}\Gamma_{2\uparrow}\right) = f_{2}\left(\tilde{A}_{1} + \tilde{B}_{1} + \tilde{A}_{2} + \tilde{B}_{2} + \tilde{A}_{s}\right). \quad (E.2.16)$$

Somando as equações (E.2.15) e (E.2.16) tem-se que,

$$\frac{i}{2} \left(G_{aa,11}^{<} - \left[G_{aa,11}^{<} \right]^{*} \right) \left(c^{2} \Gamma_{2\uparrow} + s^{2} \Gamma_{2\downarrow} \right) + \frac{i}{2} \left(G_{aa,33}^{<} - \left[G_{aa,33}^{<} \right]^{*} \right) \left(c^{2} \Gamma_{2\downarrow} + s^{2} \Gamma_{2\uparrow} \right) + i f_{2} \left(G_{aa,11}^{r} - \left[G_{aa,11}^{r} \right]^{*} \right) \left(c^{2} \Gamma_{2\uparrow} + s^{2} \Gamma_{2\downarrow} \right) + i f_{2} \left(G_{aa,33}^{r} - \left[G_{aa,33}^{r} \right]^{*} \right) \left(c^{2} \Gamma_{2\downarrow} + s^{2} \Gamma_{2\uparrow} \right) = \tilde{A}_{1} (f_{2} - f_{1}) + \tilde{B}_{1} (f_{2} - \bar{f}_{1}) + \tilde{A}_{2} (f_{2} - f_{2}) + \tilde{B}_{2} (f_{2} - \bar{f}_{2}) + \tilde{A}_{s} (f_{2} - f_{s}) \quad (E.2.17)$$

Somando (E.2.17) com a equação (E.2.12) obtém-se que,

$$\begin{split} \left[\mathbf{G}_{aa}^{r}(\omega)\boldsymbol{\Sigma}_{2}^{<}(\omega) + \mathbf{G}_{aa}^{<}(\omega)\boldsymbol{\Sigma}_{2}^{a}(\omega) + \mathrm{H.c.}\right]_{11+33} = \\ & A_{s}(f_{2} - f) + A_{1}(f_{2} - f_{1}) + B_{1}(f_{2} - \bar{f}_{1}) + B_{2}(f_{2} - \bar{f}_{2}) + \\ & + \tilde{A}_{1}(f_{2} - f_{1}) + \tilde{B}_{1}(f_{2} - \bar{f}_{1}) + \tilde{B}_{2}(f_{2} - \bar{f}_{2}) + \tilde{A}_{s}(f_{2} - f_{s}) + \end{split}$$

ou ainda,

$$\begin{bmatrix} \mathbf{G}_{aa}^{r}(\omega) \mathbf{\Sigma}_{2}^{<}(\omega) + \mathbf{G}_{aa}^{<}(\omega) \mathbf{\Sigma}_{2}^{a}(\omega) + \text{H.c.} \end{bmatrix}_{11+33} = (A_{1} + \tilde{A}_{1})(f_{2} - f_{1}) + (B_{1} + \tilde{B}_{1})(f_{2} - \bar{f}_{1}) + (B_{2} + \tilde{B}_{2})(f_{2} - \bar{f}_{2}) + (A_{s} + \tilde{A}_{s})(f_{2} - f_{s})$$

e substituindo na fórmula para a corrente ${\cal I}_2$ obtém-se finalmente:

$$I_2 = \frac{e}{h} \int d\omega [A_{22}(f_2 - \bar{f}_2) + A_{21}(f_2 - \bar{f}_1) + Q_{21}(f_2 - f_1) + Q_{2s}(f_2 - f_1)].$$
(E.2.18)

Na equação (E.2.18) foram definidas as seguintes amplitudes: $A_{22} = B_2 + \tilde{B}_2$, $A_{21} = B_1 + \tilde{B}_1$, $Q_{2s} = A_s + \tilde{A}_s$ e $Q_{12} = A_1 + \tilde{A}_1$. As expressões para estas amplitudes são das pelas equações (3.3.10) a (3.3.13) no capítulo 3. Parte IV

ARTIGOS
Phys. Rev. B 81, 094526 (2010)

A seguir é apresentado o primeiro artigo, publicado no *Physical Review B*, realizado durante este trabalho de doutorado. Neste artigo são explorados os efeitos das interações intra e inter pontos quânticos no sistema $F - PQ_1 - PQ_2 - S$. Os resultados mostrados no artigo são aqueles discutidos no capítulo 4 dando enfoque especial às regiões de condutância diferencial negativa as quais foram explicadas pelas assimetrias na LDOS dos pontos quânticos.

PHYSICAL REVIEW B 81, 094526 (2010)

Andreev tunneling through a double quantum-dot system coupled to a ferromagnet and a superconductor: Effects of mean-field electronic correlations

E. C. Siqueira* and G. G. Cabrera[†]

Instituto de Física "Gleb Wataghin," UNICAMP, CP 6165, Campinas 13083-970, SP, Brazil (Received 17 August 2009; revised manuscript received 7 February 2010; published 30 March 2010)

We study the transport properties of a hybrid nanostructure composed of a ferromagnet, two quantum dots, and a superconductor connected in series. By using the nonequilibrium Green's function approach, we have calculated the electric current, the differential conductance, and the transmittance for energies within the superconductor gap. In this regime, the mechanism of charge transmission is the Andreev reflection, which allows for a control of the current through the ferromagnet polarization. We have also included interdot and intradot interactions, and have analyzed their influence through a mean-field approximation. In the presence of interactions, Coulomb blockade tend to localize the electrons at the double-dot system, leading to an asymmetric pattern for the density of states at the dots, and thus reducing the transmission probability through the device. In particular, for nonzero polarization, the intradot interaction splits the spin degeneracy, reducing the maximum value of the current due to different spin-up and spin-down densities of states. Negative differential conductance appears for some regions of the voltage bias, as a result of the interplay of the Andreev scattering with electronic correlations. By applying a gate voltage at the dots, one can tune the effect, changing the voltage region where this novel phenomenon appears. This mechanism to control the current may be of importance in technological applications.

DOI: 10.1103/PhysRevB.81.094526

PACS number(s): 74.45.+c, 73.63.Kv, 73.23.Hk, 74.78.Na

I. INTRODUCTION

The interest in transport properties of mesoscopic systems has increased a lot due to their potential for present and future technologies. Recent advances in the experimental development of nanostructures are mainly aimed at the study of purely quantum phenomena and effects based on electronspin properties (spintronics). In particular, hybrid resonant structures composed by one or more quantum dots (QDs) coupled to normal (N), ferromagnetic (F), and superconductor (S) metals have been studied.¹⁻⁸ In systems composed by one quantum dot, electron-spin properties have been extensively explored. In the special case of junctions composed by a ferromagnet and a superconductor it is possible to construct spin valves which control the current flow through those systems. Andreev reflection (AR) permits such control, by varying the polarization of the ferromagnet attached to the system, as shown in several papers.⁹⁻¹⁵ AR (Ref. 16) is a mechanism in which a Cooper pair is formed in the superconductor from the combination of an incident electron coming from the normal metal with energy ω and spin σ , with another electron with energy $-\omega$ and spin $-\sigma$. Both electrons enter the superconductor as a Cooper pair, leaving a reflecting hole in the ferromagnetic electrode. Andreev states are located within the superconductor gap, where no quasiparticles states are available.

In this work we have studied the transport properties of a hybrid nanostructure composed by a ferromagnet, two quantum dots, $^{14,17-22}$ and a superconductor connected in series (F-QD_a-QD_b-S). The addition of an extra quantum dot will allow us to study the interplay of electron correlations at the dots (for both intradot and interdot interactions), with the Andreev current. Figure 1 shows a schematic diagram of the system. The superconductor chemical potential is fixed to zero ($\mu_S=0$) and the bias is applied to the ferromagnetic

electrode. There are also applied gate voltages at the dots a and b, namely, V_{ga} and V_{gb} , respectively. By using the non-equilibrium Green's function, $^{9,23-25}$ we have calculated the current (I), differential conductance (dI/dV), Andreev transmittance (T_{AR}) , and the local density of states (LDOS) at the dots. All quantities are calculated for energies within the superconducting gap, the relevant range for the Andreev reflection, as functions of the voltage bias. We have also included intradot and interdot Coulomb correlations at the dots, and have analyzed its influence on the electric current through a mean-field approximation. In solids, both correlations compete to form charge or spin modulated structures. Those symmetry broken states are not possible in finite systems, as it is the case in our double-dot sample.²⁶ However, dot a is coupled to a ferromagnet, which breaks spin symmetry and dot b is coupled to a superconductor, which acts as a charge reservoir. Thus, interesting effects are expected, when the electronic interactions at the dots are taken into account. In this paper, those effects are displayed by the differential conductance, which shows asymmetric regions of negative values as a function of the applied bias, when the $I \times V$ characteristics are obtained. Negative differential conductance (NDC) have been observed in hybrid nanostructures composed by normal metals,27 semiconductor-based devices,28



FIG. 1. Schematic showing the system studied in this work. The dot coupled to the ferromagnet electrode (F) is called a, and b is the one coupled to the S. The superconductor has its chemical potential fixed to zero and the voltage bias is applied to the ferromagnet. Gate voltages are also applied at the dots. The different couplings are also indicated in the figure.

1098-0121/2010/81(9)/094526(10)

094526-1

©2010 The American Physical Society

and more recently in molecular Josephson junctions.²⁹ There are also some theoretical studies on the NDC effect in those systems, using models beyond the mean-field approximation.^{30–36} In our work, electron interactions at the dots are treated within a mean-field approach. This approximation, plus additional correlations introduced through couplings to the F/S electrodes, gives rise to NDC effects. For Andreev currents, correlation parameters at the dots are limited by the size of the superconductor gap.

This paper is organized as follows: in Sec. II we present the model under consideration and derive the transport properties by using the nonequilibrium Green's functions. In Sec. III the numerical results are presented and discussed. Some conclusions are given in Sec. IV.

II. MODEL AND FORMULAS

A. Hamiltonian

The system displayed in Fig. 1 is described by the following Hamiltonian:

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_{\mathrm{F}} + \mathcal{H}_{\mathrm{S}} + \mathcal{H}_{dqd} + \mathcal{H}_{T},$$
$$\mathcal{H}_{\mathrm{F}} = \sum_{k\sigma} (\epsilon_{k} - \sigma h - \mu_{\mathrm{F}}) a_{k\sigma}^{\dagger} a_{k\sigma},$$
$$\mathcal{H}_{\mathrm{S}} = \sum_{p\sigma} \epsilon_{p} s_{p\sigma}^{\dagger} s_{p\sigma} + \sum_{p} [\Delta s_{p\uparrow}^{\dagger} s_{-p\downarrow}^{\dagger} + \mathrm{H.c.}],$$
$$\hat{\mathcal{H}}_{dqd} = \sum_{\sigma} E_{a\sigma} \hat{n}_{a\sigma} + \sum_{\sigma} E_{b\sigma} \hat{n}_{b\sigma},$$

where

$$E_{a\sigma} = eV_{ga} + \frac{\mathcal{K}}{2}\langle \hat{n}_b \rangle + \frac{\mathcal{U}}{2}\langle \hat{n}_{a\bar{\sigma}} \rangle, \qquad (2)$$

$$E_{b\sigma} = eV_{gb} + \frac{\mathcal{K}}{2} \langle \hat{n}_a \rangle + \frac{\mathcal{U}}{2} \langle \hat{n}_{b\bar{\sigma}} \rangle,$$

$$\mathcal{H}_{T} = \sum_{k\sigma} [t_{f}a_{k\sigma}^{\dagger}c_{a\sigma} + \text{H.c.}] + \sum_{p\sigma} [t_{s}s_{p\sigma}^{\dagger}c_{b\sigma} + \text{H.c.}] + \sum_{\sigma} [t_{ab}c_{a\sigma}^{\dagger}c_{b\sigma} + \text{H.c.}].$$
(3)

 $\mathcal{H}_{\rm F}$ is the Hamiltonian of the F described by the Stoner model. The spin bands of F are shifted by *h*, the exchange energy. The ferromagnet chemical potential is fixed by the applied bias, i.e., $\mu_{\rm F} = eV$. $\mathcal{H}_{\rm S}$ is the Hamiltonian for a BCS superconductor with chemical potential fixed to zero as the ground, $\mu_{\rm S} = 0$, and Δ being the superconducting gap. \mathcal{H}_{dqd} is the Hamiltonian for the quantum dots in the mean-field approximation, which permits an exact equation for the selfenergy. The energies $E_{a\sigma}$ and $E_{b\sigma}$ are renormalized by the interactions \mathcal{K} (interdot) and \mathcal{U} (intradot). The interactions also couple the renormalized energy levels with the mean occupations $\langle \hat{n}_a \rangle$ and $\langle \hat{n}_b \rangle$. In addition, it is included a gate voltage at the quantum dots *a* and *b*, namely, V_{ga} and V_{gb} ,

PHYSICAL REVIEW B 81, 094526 (2010)

respectively. \mathcal{H}_T is the Hamiltonian which describes all the tunneling processes: between dot *a* and the ferromagnet, with amplitude t_f , between dots with amplitude t_{ab} , and between dot *b* and the superconductor, with amplitude t_s .

We have not considered the occurrence of the Kondo resonance at the dots. While the Kondo effect has been experimentally observed in semiconducting quantum dots, coupling the dot to a ferromagnetic electrode will split the dot level, leading to the suppression of the Kondo effect.^{37,38} Electron pairing in the superconductor electrode also competes with Kondo through the proximity effect.²⁰ Now, a discussion about the relative magnitude of the correlation parameters is in order. In this paper, \mathcal{U} and \mathcal{K} are limited to the gap value since we analyzed the contribution of a pure Andreev current (subgap current). This also restricts the voltages to very small values, typically on the order of mV or smaller. Our study is then confined to the weak correlation regime.

B. Green's functions

To calculate the transport properties we have used the nonequilibrium Green's function method.^{9,23-25} All the physical quantities can be cast in terms of the Green's function of the dots. By using the Nambu 4×4 notation the retarded Green's functions of the quantum dots are given by

$$\mathbf{G}_{aa}^{r} = \mathbf{G}_{aa}^{r0} + \mathbf{G}_{aa}^{r} \mathbf{t}_{ab}^{\dagger} \mathbf{G}_{bb}^{r0} \mathbf{t}_{ab} \mathbf{G}_{aa}^{r0}, \qquad (4)$$

$$\mathbf{G}_{bb}^{r} = \mathbf{G}_{bb}^{r0} + \mathbf{G}_{bb}^{r} \mathbf{t}_{ab}^{\dagger} \mathbf{G}_{aa}^{r0} \mathbf{t}_{ab} \mathbf{G}_{aa}^{r0}$$
(5)

with

(1)

$$\mathbf{G}_{aa}^{r0} = \mathbf{g}_{aa}^{r} (1 - \Sigma_{\rm F}^{r} \mathbf{g}_{aa}^{r})^{-1}, \tag{6}$$

$$\mathbf{G}_{bb}^{r0} = \mathbf{g}_{bb}^{r} (1 - \Sigma_{S}^{r} \mathbf{g}_{bb}^{r})^{-1}.$$
 (7)

In these equations \mathbf{G}_{aa}^r is the Green's function of the quantum dot a; \mathbf{G}_{bb}^r is the Green's function of the quantum dot b; \mathbf{g}_{aa}^r and \mathbf{g}_{bb}^r are the Green's functions of the dots a and b isolated from the electrodes; \mathbf{t}_{ab} describes the coupling between the dots; and Σ_F^r and Σ_S^r are the retarded self-energies which describe the coupling of the dots with the superconductor and ferromagnet electrodes, respectively. Explicitly these self-energies are written as

$$\Sigma_{\rm F}^{r,a}(\omega) = \mp \frac{i}{2} \begin{bmatrix} \Gamma_{f\uparrow} & 0 & 0 & 0\\ 0 & \Gamma_{f\downarrow} & 0 & 0\\ 0 & 0 & \Gamma_{f\downarrow} & 0\\ 0 & 0 & 0 & \Gamma_{f\uparrow} \end{bmatrix}$$
(8)

with $\Gamma_{f\sigma} = 2\pi |t_f|^2 N_{\sigma}$ is the coupling strength, with t_f being the tunneling amplitude and N_{σ} the density of states for the ferromagnet spin σ band; and

ANDREEV TUNNELING THROUGH A DOUBLE QUANTUM-...

$$\Sigma_{\rm S}^{r,a}(\omega) = \mp \frac{i}{2} \Gamma_s \rho(\omega) \begin{vmatrix} 1 & -\frac{\Delta}{\omega} & 0 & 0 \\ -\frac{\Delta}{\omega} & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & \frac{\Delta}{\omega} \\ 0 & 0 & \frac{\Delta}{\omega} & 1 \end{vmatrix}, \qquad (9)$$

where $\Gamma_s = 2\pi |t_s|^2 N_s$, with N_s being the density of states of the superconductor in the normal state and ρ_s is the modified BCS density of states $\rho(\omega) \equiv \frac{|\omega|\mathcal{H}(\omega|-\Delta)}{\sqrt{\omega^2 - \Delta^2}} + \frac{\omega \mathcal{H}(\Delta-|\omega|)}{\sqrt{\omega^2 - \omega^2}}$, with the imaginary part accounting for Andreev states within the gap.^{9,39}

Besides the retarded and advanced Green's functions, it is necessary to obtain the Keldysh Green's functions, which are calculated by the equation of motion technique. Since it is used a mean-field approximation for the interaction, the result for this Green's function is exact. The equation obtained for the Keldysh Green's function of dot a is given by

$$\mathbf{G}_{aa}^{<}(\omega) = \mathbf{G}_{aa}^{r}(\omega) \mathbf{\Sigma}_{T}^{<}(\omega) \mathbf{G}_{aa}^{a}(\omega)$$
(10)

with the "lesser" self-energy $\Sigma_T^{<}$,

$$\Sigma_T^{<}(\omega) = \Sigma_F^{<}(\omega) + \mathbf{t}_{ab}^{\dagger} \mathbf{G}_{bb}^{\prime 0} \Sigma_S^{<}(\omega) \mathbf{G}_{bb}^{a0}(\omega) \mathbf{t}_{ab}.$$
(11)

Correspondingly, the Keldysh equation for quantum dot b is given by

$$\mathbf{G}_{bb}^{<}(\omega) = \mathbf{G}_{bb}^{r}(\omega) \mathbf{\Sigma}_{Tb}^{<}(\omega) \mathbf{G}_{bb}^{a}(\omega) \tag{12}$$

with the lesser self-energy $\Sigma_{Tb}^{<}$,

$$\Sigma_{rt}^{<}(\omega) = \Sigma_{s}^{<}(\omega) + \mathbf{t}_{ab} \mathbf{G}_{ac}^{\prime 0} \Sigma_{s}^{<}(\omega) \mathbf{G}_{ac}^{a0}(\omega) \mathbf{t}_{ab}^{\dagger}.$$
 (13)

The lesser self-energy for the ferromagnet electrode is given by

$$\Sigma_{\rm F}^{<}(\omega) = i \begin{bmatrix} f_{\rm F} \Gamma_{f\uparrow} & 0 & 0 & 0\\ 0 & \bar{f}_{\rm F} \Gamma_{f\downarrow} & 0 & 0\\ 0 & 0 & f_{\rm F} \Gamma_{f\downarrow} & 0\\ 0 & 0 & 0 & \bar{f}_{\rm F} \Gamma_{f\uparrow} \end{bmatrix}$$
(14)

in which $f_F = f(\omega - eV)$ and $\overline{f}_F = (\omega + eV)$ are the Fermi functions for electrons and holes, respectively.

The lesser self-energy for the superconductor electrode is given by

PHYSICAL REVIEW B 81, 094526 (2010)

$$\boldsymbol{\Sigma}_{\mathbf{S}}^{<}(\boldsymbol{\omega}) = if \boldsymbol{\Gamma}_{\mathbf{S}} \tilde{\boldsymbol{\rho}}(\boldsymbol{\omega}) \begin{bmatrix} 1 & -\frac{\Delta}{\boldsymbol{\omega}} & 0 & 0 \\ -\frac{\Delta}{\boldsymbol{\omega}} & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & \frac{\Delta}{\boldsymbol{\omega}} \\ 0 & 0 & \frac{\Delta}{\boldsymbol{\omega}} & 1 \end{bmatrix}, \quad (15)$$

where $f_{\rm S} = f(\omega)$ is the Fermi function for the superconductor electrode and $\tilde{\rho} = \frac{|\omega|}{\sqrt{\omega^2 - \Delta^2}}$ is the conventional BCS density of states.

Equation (11) shows that the dot a, which is coupled to the ferromagnetic electrode on its left side, "sees" on its right side an effective electrode as a result of the interplay of dot bwith the superconductor. Equation (13) can be interpreted in similar terms for dot b, with a "bare" superconductor electrode on the right side and an effective electrode on the left, resulting from the interaction of dot a with the ferromagnet. Since the superconductor and the ferromagnet present different band structures, there is an intrinsic asymmetry in this system which manifests itself in the transport properties.

C. Physical quantities

The Green's functions of the last section, calculated by the equation of motion method, permit to determine all the physical quantities necessary to analyze the transport properties of the $F-QD_a-QD_b-S$ system. Since the interaction couples the dot levels through the mean occupation, as shown by Eqs. (2) and (3), it is necessary to perform a selfconsistent calculation to determine the occupation at the dots first. Then, one can proceed to calculate the physical quantities of interest. In the following we show the expressions we have used to compute the LDOS, the current, the transmittance, and the mean occupation.

1. Local density of states

The LDOS of the quantum dots comes from the matrix elements (Refs. 11 and 33) of the retarded Green's function matrix (electron components in Nambu space). The LDOS for dots a and b are, respectively,

LDOS-A =
$$-\frac{1}{\pi} \text{Im}[G_{aa,11}^r + G_{aa,33}^r],$$
 (16)

LDOS-B =
$$-\frac{1}{\pi} \text{Im}[G_{bb,11}^r + G_{bb,33}^r].$$
 (17)

2. Transmittance and current

Since the current is conserved, it can be calculated at any point of the circuit. Here, we choose to calculate the current at the ferromagnetic electrode, as the temporal variation in the number of electrons, i.e.,

$$I = -e\left\langle \frac{d\hat{N}_F}{dt} \right\rangle,$$

where $\hat{N}_{\rm F} = \sum_{k\sigma} a_{k\sigma}^{\dagger} a_{k\sigma}$. By using the Heisenberg equation and the definition of the lesser Green's function of the dot *a*, it is possible to write the current as follow:

$$I = \frac{e}{\hbar} \int d\omega [\mathbf{G}_{aa}^{r}(\omega) \boldsymbol{\Sigma}_{\mathrm{F}}^{<}(\omega) + \mathbf{G}_{aa}^{<}(\omega) \boldsymbol{\Sigma}_{\mathrm{F}}^{a}(\omega) + \mathrm{H.c.}]_{11+33},$$
(18)

where the index 11+33 indicates a sum over the electron components in the Nambu space matrix. By substituting the matrix elements, the current can be cast to the following form:

$$I = \frac{e}{h} \int d\omega A(\omega) (f_{\rm F} - \bar{f}_{\rm F}).$$
(19)

In this work we only consider Andreev transport for energies within the superconductor gap. Thus, the current amplitude corresponding to the contribution of quasiparticles tunneling is zero.

The expression for the amplitude $A(\omega)$ is given by

$$\begin{split} A &= \Gamma_{f\uparrow} (|G_{aa,14}^{r}|^{2} \Gamma_{f\uparrow} + |G_{aa,12}^{r}|^{2} \Gamma_{f\downarrow}) \\ &+ \Gamma_{f\downarrow} (|G_{aa,34}^{r}|^{2} \Gamma_{f\uparrow} + |G_{aa,32}^{r}|^{2} \Gamma_{f\downarrow}). \end{split}$$

The transmittance is obtained from the current formula,

$$T_{AR} = \frac{1}{2} [\Gamma_{f\uparrow} (|G_{aa,14}'|^2 \Gamma_{f\uparrow} + |G_{aa,12}'|^2 \Gamma_{f\downarrow}) + \Gamma_{f\downarrow} (|G_{aa,34}'|^2 \Gamma_{f\uparrow} + |G_{aa,32}'|^2 \Gamma_{f\downarrow})].$$
(20)

3. Self-consistent calculations

Since the Green's functions are dependent on the mean occupations via Eqs. (2) and (3), it is necessary to calculate those quantities at the dots. From the definition of the lesser Green's function, one straightforwardly obtains the system of equations below

$$\langle n_{a\uparrow} \rangle = \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{+\infty} G_{aa,11}^{<}(\omega),$$

$$\langle n_{a\downarrow} \rangle = \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{+\infty} G_{aa,33}^{<}(\omega),$$

$$\langle n_{b\uparrow} \rangle = \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{+\infty} G_{bb,11}^{<}(\omega),$$

$$\langle n_{b\downarrow} \rangle = \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{+\infty} G_{bb,33}^{<}(\omega).$$

These integral equations have to be solved numerically in a self-consistent way. Once the occupation numbers are obtained, it is possible to calculate the other physical quantities. Results are shown below.

PHYSICAL REVIEW B 81, 094526 (2010)

III. RESULTS AND DISCUSSION

Next, we present the results obtained from numerical calculations. First, we show the LDOS at the quantum dots in the absence of electronic correlations. We investigate the effects of the different couplings of the model, i.e., the coupling between dots and the coupling of the dots with the leads. In the following sections, we discuss the role of the interactions. All examples displayed for the latter case correspond to finite polarization of the ferromagnet, thus keeping our results on safe ground when using mean-field approximations. We use the P=0.3 and 0.8 cases as prototypes, being this range typical of most well known and used ferromagnetic leads.⁴⁰ We analyze separately the effects of the interactions. The interdot interaction K breaks the LDOS symmetry at the dots, changing the position and amplitude of resonances. As a result, we find the NDC effect for a range of values of parameters. The intradot interaction \mathcal{U} lifts the spin degeneracy, as can be seen by the splitting of the differential conductance and LDOS peaks. In the final section, we present results when both interactions, \mathcal{K} and \mathcal{U} , are active and are of the same order of magnitude. The interplay of both magnitudes leads to the NDC phenomenon in some range of the bias. This voltage region can be controlled and tuned by application of gate voltages at the dots.

A. Noninteracting case

In this section, the LDOS of the quantum dots is described without interactions. This permits us to analyze the resonance structure presented by these quantities, which plays a central role in all transport properties, including the interacting case as well. The system is asymmetric since the ferromagnetic left electrode is modeled with a continuous density of states while the superconductor electrode, on the right side, presents a gap for quasiparticles states, with a complex density of states within the gap, corresponding to evanescent Andreev states, responsible for the Copper pair conversion at the interface.

Figure 2 shows the LDOS at the dots, for different values of the interdot coupling (electron hopping between dots) t_{ab} , in units of the superconducting gap. For t_{ab} =0.02, the dots are almost decoupled from each other. As a result, features of the density of states mainly reflect the coupling with the electrodes. LDOS for dot *a* presents one peak centered in ω =0 with a finite width. The broadening results from the hybridization of the dot level with the ferromagnetic band. There is a finite probability for the electron to escape from the dot to the electrode. On the other hand, LDOS-B presents two sharp symmetrical peaks. This resonant structure represents the hybridization between the dot level with the Andreev states. The peaks correspond to the electron and hole channels, as expected from the BCS model for the superconductor electrode.

As the coupling between the dots is increased, two additional peaks at the center emerge for both LDOS, as observed in the examples for t_{ab} =0.30 and 0.46. These peaks come from the resonance between the discrete dot levels. For LDOS-B, the intensity of the Andreev peaks decay with the dot coupling.

ANDREEV TUNNELING THROUGH A DOUBLE QUANTUM -...



FIG. 2. (Color online) LDOS for different values of coupling between dots, t_{ab} . Fixed parameters: Γ_f =0.1, Γ_s =1.0, P=0, k_BT =0.01, and $eV_{ga}=eV_{gb}$ =0. (a) LDOS for QD *a*, coupled to the ferromagnet. For t_{ab} =0.02, the LDOS is dominated by the coupling with the ferromagnet, revealed by the broadening of the central peak. By increasing t_{ab} , the resonances from the superconductor (external peaks) and from interdot coupling (central peaks) appear. (b) LDOS for QD *b*, coupled to the superconductor. For t_{ab} =0.02, the LDOS is dominated by the coupling with the superconductor, as displayed by the equidistant peaks around ω =0; these peaks are the Andreev resonances. By increasing t_{ab} , the interdot coupling peaks (central peaks) appear in addition to the Andreev resonances. All parameters are expressed in units of the superconductor gap.

The effect of the coupling with the superconductor is illustrated by the LDOS curves shown in Fig. 3. When the interaction with the superconductor is weak $\Gamma_s=0.05$, both LDOS present a two-peak structure resulting from the interdot coupling ($t_{ab}=0.5$ in the examples shown). When the coupling with the superconductor is increased, the Andreev peaks appear and are more intense in LDOS-B.

The effect on the LDOS by varying the coupling with ferromagnetic electrode is shown in Fig. 4. When the coupling with the ferromagnet is increased, the discrete structure of the LDOS is transformed into a continuum of states, as a result of the hybridization of the discrete dot levels with the continuous band of the ferromagnet. Internal peaks almost disappear for $\Gamma_f > 0.5$.

Isolated quantum dots present one level degenerate in spin. When coupled to each other with t_{ab} , there is an admix-



FIG. 3. (Color online) LDOS for different values of the coupling with the superconductor, Γ_s . Fixed parameters: Γ_f =0.1, t_{ab} =0.5, P=0, k_BT =0.01, and $eV_{ga}=eV_{gb}$ =0. (a) LDOS for quantum dot *a*, coupled to the ferromagnet. (b) LDOS for quantum dot *b*, coupled to the superconductor. The distinct behavior of LDOS-A and LDOS-B is explained by the stronger coupling of *b* with S. The increase in the coupling with S results in a bigger separation between the resonance peaks. All parameters are expressed in units of the superconductor gap.

PHYSICAL REVIEW B 81, 094526 (2010)



FIG. 4. (Color online) LDOS for different values of coupling with the ferromagnet, Γ_f . Fixed parameters: $\Gamma_s = 1.0$, $t_{ab} = 0.5$, P = 0, $k_B T = 0.01$, and $eV_{ga} = eV_{gb} = 0$. (a) LDOS for quantum dot a, coupled to the ferromagnet. (b) LDOS for quantum dot b, coupled to superconductor. By increasing Γ_f , the density of states presents a broader pattern, displaying an admixture between the ferromagnetic energy band and the hybridized states of the dots. All parameters are expressed in units of the superconductor gap.

ture of them, resulting in a bonding and an antibonding levels, in analogy with a H_2 molecule.²⁶ In our model, those levels corresponds to the central peaks of the LDOS. When the electrodes are attached to the double-dot system, the above peaks broaden and two additional peaks appear corresponding to the superconducting Andreev states. By tuning the parameters of the model, it is possible to change the number of peaks, their widths and the distance between them, which in turn can be used to control the current.

B. Interacting case: Interdot interaction

In Fig. 5(a) we plot some $I \times V$ characteristics for different values of the interdot interaction \mathcal{K} . These curves show a plateau pattern which is due to the peak structure of the



FIG. 5. (Color online) (a) current (*I*) versus applied bias (*V*) for some values of interdot interaction. (b) Corresponding differential conductance, showing regions of negative values. (c) Andreev transmittance (T_{AR}) for some values of applied bias for \mathcal{K} =0.22. (d) Andreev transmittance (T_{AR}) for some values of \mathcal{K} , for applied bias eV=0.83. Fixed parameters: Γ_f =0.19, Γ_s =0.40, t_{ab} =0.5, P=0.3, U=0, k_BT =0.01, and eV_{ga} = eV_{gb} =0. All parameters are expressed in units of the superconductor gap.

LDOS at the quantum dots. When the interaction is increased, the plateau value is reduced, ranging from I=0.90for $\mathcal{K}=0$ to I=0.30 for $\mathcal{K}=0.45$, since higher values of the interaction implies a stronger Coulomb repulsion between dots. But for small voltages (eV < 0.30), we observe an unusual behavior, where the trend is inverted, although this is a tiny effect. In Fig. 5(b), we plot the corresponding differential conductance, which allow for a better resolution of the $I \times V$ curves. The symmetric structure for $\mathcal{K}=0$ is broken when $\mathcal{K} \neq 0$, the asymmetry being more pronounced the higher the values of \mathcal{K} . For some examples of the figure, NDC in the characteristics is found around $\mathcal{K}=0.6$. From our numerical calculations, NDC effects are present in the range $0.08 < \mathcal{K} < 0.4$. For \mathcal{K} greater than 0.4, NDC is suppressed and a positive peak emerges in dI/dV, as can be seen in the example for $\mathcal{K}=0.45$.

From these results, we conclude that the mechanism of the NDC is not linearly related to the Coulomb blockade effect. The interaction plays a more subtle role in changing the transmittance of the system. In fact, looking at the differential conductance, we note that when increasing \mathcal{K} , the second peak for positive bias is suppressed. Thus, for some values of \mathcal{K} there is a suppression of some of the resonant peaks and this causes an additional reduction in the transmittance for some values of the applied bias. This effect causes the differential conductance to assume negative values. The Andreev transmittance is displayed in Figs. 5(c) and 5(d). There is a variation with the applied bias, in contrast to the noninteracting case. The interaction couples the occupation number at the dots, which implies a nontrivial dependence of the transmittance with the applied bias. In Fig. 5(c), we plot the transmittance for $\mathcal{K}=0.22$, for some values of the applied bias. There is a reduction in the amplitude with the increase in the bias but the spectrum is symmetric with respect to ω . In Fig. 5(d), we show the transmittance at fixed bias eV=0.83, for various values of \mathcal{K} . There is a reduction in the transmittance and a shift of the peaks, however the variation is not systematic, as shown by the example for $\mathcal{K}=0.45$, which does not follow the trend of the other values. Reduction in the transmittance with increasing bias is one of the causes of NDC. However, the absence of NDC for negative bias strongly hints that there are additional ingredients to explain the phenomenon. One important factor is the asymmetry in the LDOS, which appears when the interaction \mathcal{K} is turned on. In Figs. 6(a) and 6(b), we show the effect of the interaction on the peak structure of the LDOS at the dots. The symmetric shape seen in Figs. 2-4 is lost when the interaction is included. By increasing the interaction toward the gap value, some peaks are suppressed (one central and one external) and other are reinforced (one central and one external), the LDOS presenting a more localized character. Central peaks of the LDOS are associated to states resonating between dots while external peaks are the channels for the Andreev reflection. The symmetry is critical to allow electronic transfer through the structure since the sum of the energies of the electrons available to form a Cooper pair have to be equal to the chemical potential of the superconductor (which is zero). Thus, the Andreev current is optimized when the LDOS peaks are symmetric and the suppression of one of them causes an effective reduction in the

PHYSICAL REVIEW B 81, 094526 (2010)



FIG. 6. (Color online) LDOS for different values of interdot interaction. Fixed parameters: $\Gamma_f=0.19$, $\Gamma_s=0.40$, $t_{ab}=0.5$, P=0.3, $\mathcal{U}=0$, $k_BT=0.01$, eV=+0.62, and $eV_{ga}=eV_{gb}=0$. (a) LDOS for quantum dot *a*, coupled to ferromagnet. (b) LDOS for quantum dot *b*, coupled to superconductor. In both, the interaction introduces an asymmetry which is related to the NDC effect. All parameters are expressed in units of the superconductor gap.

current, with the emergence of the NDC effect.

When a negative bias is applied to the ferromagnetic electrode, its chemical potential is reduced in relation to the superconductor's one. Thus, the current is established by extracting Cooper pairs from superconductor electrode. Those electrons, with antiparallel spins, fill the lower energy states available at the dots, so only the peaks of the negative frequency branch of the LDOS will participate in the conduction process. This is the explanation for the absence of NDC for negative bias in the $I \times V$ characteristics, as shown in Fig. 5(a).



FIG. 7. (Color online) Current and differential conductance vs applied bias for some values of the gate voltage at dot *a*. Fixed parameters: $\Gamma_f=0.2$, $\Gamma_s=0.4$, $t_{ab}=0.50$, P=0.3, $\mathcal{K}=0.22$, $\mathcal{U}=0$, $k_BT=0.01$, and $V_{gb}=0$. (a) Current versus applied bias: the gate potential modifies the current profile appearing some regions of NDC in both, negative and positive values of the applied bias. (b) Differential conductance for the corresponding $I \times V$ curves. All parameters are expressed in units of the superconductor gap.

ANDREEV TUNNELING THROUGH A DOUBLE QUANTUM-...



FIG. 8. (Color online) LDOS of dot b vs electron energy for some values of the gate voltage at dot a. Fixed parameters: Γ_f =0.2, Γ_s =0.4, t_{ab} =0.50, P=0.3, k_BT =0.01, V_{gb} =0, \mathcal{K} =0.22, and \mathcal{U} =0. (a) LDOS-B for applied bias eV=-0.70. The second peak for negative energy is progressively suppressed and vanishes at eV_{ga} =-0.39. (b) LDOS-B for applied bias eV=+0.70. The first peak for positive energy, that was absent for eV_{ga} =0, emerges with application of the gate voltage. All parameters are expressed in units of the superconductor gap.

Next, to show that the NDC effect originates from the asymmetry of the LDOS, we have recalculated the \mathcal{K} =0.22 case of Fig. 5 but now applying a gate voltage at dot a while keeping the gate voltage at the other dot fixed and equal to $\mu_{\rm S}=0$. The results are qualitatively similar if the gate potential at dot b is varied while the one at a is kept fixed and equal to μ_{s} . As shown in Figs. 7(a) and 7(b), the NDC appears for negative values of the applied bias, for V_{ga} approximately ranging from -0.26 to -0.39. In the range -0.13 $< V_{ga} < +0.13$, the NDC appears for positive bias. To make contact with the asymmetry of the LDOS at the dots, in Figs. 8(a) and 8(b), we plot the LDOS-B for values of the bias at the neighborhood of the NDC, namely, eV = -0.70 and +0.70. The LDOS-A presents a similar behavior. By tuning the gate voltage V_{ga} , we can change the amplitude and position of the peaks in the LDOS. Eventually, some of the peaks vanish, resulting in NDC effect. The above figures corroborate the role of the LDOS in the appearance of the NDC regions. In fact, peaks of the LDOS and transmittance are resonances resulting from the coupling between the dots and the electrodes. As shown in Figs. 5 and 6, the interdot interaction affects the LDOS and the transmittance in a way similar to "destructive interference," changing the position and amplitude of the peaks. One can tune such "destructive interference," by introducing a gate voltage, thus modifying the values of bias where NDC takes place, as shown in Fig. 8. This process of controlling the current through the device may be important for practical applications.



FIG. 9. (Color online) Current and differential conductance vs applied bias for some values of the intradot interaction. Fixed parameters: $\Gamma_f = 0.1$, $\Gamma_s = 1.00$, $t_{ab} = 0.50$, P = 0.80, K = 0, $k_B T = 0.01$, and $eV_{ga} = eV_{gb} = 0$. (a) Current vs applied bias. (b) Differential conductance. The intradot interaction lifts the spin degeneracy, producing a splitting of the peaks in the dI/dV curves. Very different values of Γ_f and Γ_s have been used in the example to get a larger separation between the resonance peaks. All parameters are expressed in units of the superconductor gap.

C. Interacting case: Intradot interaction

Next, we present mean-field results that include the intradot (onsite) interaction \mathcal{U} , with no interdot repulsion ($\mathcal{K}=0$). As shown in Eqs. (2) and (3), the intradot interaction splits the up-spin and down-spin states at each quantum dot, with the corresponding splitting of the transmittance and differential conductance peaks. However, as indicated by Eqs. (2) and (3), this effect can only be observed for different up-spin and down-spin occupations. This condition is met for nonzero values of the polarization P of the ferromagnet, when different numbers of spin-up and spin-down electrons are injected to the dots. The rates at which electrons are injected are $\Gamma_{f\uparrow}/h = \Gamma_f(1+P)/h$ and $\Gamma_{f\downarrow}/h = \Gamma_f(1-P)/h$ for spin up and down, respectively. In Fig. 9 the $I \times V$ characteristics and the corresponding differential conductance are shown for different values of the intradot interaction. As long as $\mathcal{U} \neq 0$, the peaks start to split and for $\mathcal{U}=0.90$ the differential conductance presents a clear pattern with eight peaks. The $I \times V$ characteristic, for U=0.90, also shows a number of additional steps and a final plateau with a reduced value of the current. The reduction in the maximum value of the current with P is explained by the reduction in the available conducting channels, as discussed in Ref. 41. Since the current is established by Andreev reflection, it is necessary an equal number of spin-up and spin-down electrons to form Cooper pairs. Since the density of states for spin down is smaller, the current is limited by the number of spin-down electrons.



FIG. 10. (Color online) Current and differential conductance vs applied bias for different values of the ferromagnet polarization. Solid lines: $V_{ga} = V_{gb} = -0.13$. Dotted lines: $V_{ga} = -0.39$ and $V_{gb} = -0.10$. Fixed parameters: $\Gamma_f = 0.20$, $\Gamma_s = 0.26$, $t_{ab} = 0.40$, $\mathcal{K} = 0.25$, $\mathcal{U} = 0.25$, and $k_B T = 0.01$. (a) Current vs applied bias. (b) Differential conductance. The increase in the polarization suppresses NDC by reducing the available states in the conduction process. All parameters are expressed in units of the superconductor gap.

In the examples presented in Fig. 9, which corresponds to P=0.80, NDC effects are absent. By increasing the polarization the NDC region is reduced and eventually disappears when we further increase the polarization. The mechanism that accounts for the NDC effect for intradot interaction is the same as the one presented in the previous sections: the reduction in the transmittance with the applied bias, combined with asymmetries of the LDOS. For values of the polarization of $\approx 0.80-0.90$, the mean number of electrons participating in the conduction is so reduced that a further reduction in the channels does not imply in a reduction in the electrical current. This is the cause of the absence of NDC in the examples of Fig. 9.

D. Interaction case: Intradot and Interdot interactions

In the previous sections we have presented results when one of the interactions is absent. However, it is possible to obtain the NDC effect when both interactions are active. In Fig. 10 we show $I \times V$ characteristics for $\mathcal{U}=\mathcal{K}=0.25$. In spite of the high polarization values, P=0.30 and 0.80, there are regions of voltage with the NDC effect in all the examples. For $eV_{ga}=eV_{gb}=-0.13$ (solid curves), NDC appears for applied bias $eV \ge 0.48$. For $V_{ga}=-0.39$ and $V_{gb}=-0.10$ the NDC appears for negative bias $eV \le -0.48$ (dotted curves). Comparing with Fig. 9, besides the different values for the interactions and gate voltages, the coupling constants t_{ab} and Γ_s have been modified. In fact, by changing the cou-

PHYSICAL REVIEW B 81, 094526 (2010)



FIG. 11. (Color online) Corresponding LDOS for some values of the applied bias. By adjusting the hopping t_{ab} and the coupling with superconductor Γ_s , it is possible to reduce the peaks of the LDOS allowing to observe the NDC even at high values of the polarization. Fixed parameters: P=0.80, $\Gamma_f=0.20$, $\Gamma_s=0.26$, t_{ab} =0.40, $\mathcal{K}=0.25$, $\mathcal{U}=0.25$, $k_BT=0.01$, and $V_{ga}=V_{gb}=-0.13$. (a) LDOS for dot *a*, coupled to ferromagnet. (b) LDOS for dot *b*, coupled to superconductor. All parameters are expressed in units of the superconductor gap.

pling constants and the bias, it is possible to suppress some peaks of the LDOS and the current will be sensitive to this reduction in the channels, even for polarization values close to unity. In this case, the NDC effect can be recovered. An example is shown in Fig. 11, where the LDOS is plotted for P=0.80 and $eV_a=eV_b=-0.13$. For the parameters chosen, the LDOS present a four-peak structure. When we increase the applied bias there is a suppression of the first and third peaks while the second and fourth are enhanced. The suppression is almost complete for the first peak of the LDOS at dot *a* and for the third peak at dot *b*. As a result, the Andreev current decreases with increasing voltage (NDC effect) since Andreev reflection requires a symmetric pair of channels in order to conduct.

IV. CONCLUSION

In this work, we have studied the effects of the interdot and intradot interactions on the transport properties of a double quantum-dot system coupled to a ferromagnet and a superconductor. Energy parameters of the theory are limited by the size of the superconductor gap. This way, the conduction through the device is controlled by Andreev scattering processes (subgap current). In the first part of the paper, the role of the coupling between dots and the couplings between dots and leads were elucidated. Next, we study the effects of

ANDREEV TUNNELING THROUGH A DOUBLE QUANTUM-...

electronic correlations at the dots within a mean-field approximation. For both interactions, interdot and intradot, we found regions of voltage with NDC. The NDC effect is a typical phenomenon in resonant tunneling spectroscopy, and since the pioneering work of Chang *et al.*, 4^2 it has been recognized as fundamental for practical applications, such as amplifiers, switching devices, and high-frequency oscillators. Differently from one-electron-tunneling resonances, for the Andreev current we need electron and hole states of opposite spins symmetrically located around the chemical potential. Thus, symmetry and lack of symmetry of the LDOS at the dots play an important role for Andreev reflection processes. Correlations tend to localize the electrons at the double-dot system, changing the LDOS by suppressing some peaks, shifting their positions, and lifting spin degeneracy, leading to an asymmetric pattern of the LDOS. This asymmetry reduces the number of available states to conduct through the Andreev reflection mechanism. By changing the polarization of the ferromagnet, one can also change the relative spin populations entering the two-dot system. The above phenomena, combined with the bias dependence of the transmittance, produce the NDC effect for some regions of the applied voltage. Through the gate voltages, one can tune the effect and change the bias region where NDC appears.

Such kind of devices, as the one considered here, are on the verge of being produced by present technology and our PHYSICAL REVIEW B 81, 094526 (2010)

theoretical study may be useful to control the current in practical applications. \mathcal{K} , \mathcal{U} , and P are intrinsic parameters, which are sample dependent. However, the NDC effect can be tuned by the gate voltages, as shown in this contribution. With the addition of a second ferromagnetic electrode, one may open channels for crossed Andreev reflections, with the control of the current by the relative polarization directions of the two ferromagnets.

A final comment on the validity of the mean-field approximation is in order. Results as those shown in Figs. 10 and 11 were obtained at finite values of the polarization and gate voltages. Under the above conditions, mean-field results can sensibly capture the physics involved and one can regard the predicted NDC effects as bona fide phenomena. Mean-field approximations are known to be extremely useful in providing a proper qualitative picture and their real range of validity usually extrapolates the theoretical predictions. However, the exact extension of the validity of the approximation can only be addressed by experiments.

ACKNOWLEDGMENTS

The authors acknowledge partial support from the Brazilian agency Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq).

*ecosta@ifi.unicamp.br

[†]cabrera@ifi.unicamp.br

- ¹W. G. van der Wiel, S. De Franceschi, J. M. Elzerman, T. Fujisawa, S. Tarucha, and L. P. Kouwenhoven, Rev. Mod. Phys. **75**, 1 (2002).
- ²I. Žutić, J. Fabian, and S. Das Sarma, Rev. Mod. Phys. **76**, 323 (2004).
- ³R. Hanson, L. P. Kouwenhoven, J. R. Petta, S. Tarucha, and L. M. K. Vandersypen, Rev. Mod. Phys. **79**, 1217 (2007).
- ⁴S. Das Sarma, J. Fabian, X. Hu, and I. Zutic, Solid State Commun. 119, 207 (2001).
- ⁵W. Z. Shangguan, T. C. Au Yeung, Y. B. Yu, and C. H. Kam, Phys. Rev. B **63**, 235323 (2001).
- ⁶Z. Chen, B. Wang, D. Y. Xing, and J. Wang, Appl. Phys. Lett. **85**, 2553 (2004).
- ⁷Q.-f. Sun, J. Wang, and T. H. Lin, Phys. Rev. B 59, 3831 (1999).
- ⁸J.-F. Feng, X.-S. Wu, and S.-S. Jiang, J. Appl. Phys. **99**, 08F713 (2006).
- ⁹Z. Y. Zeng, B. Li, and F. Claro, Phys. Rev. B 68, 115319 (2003).
- ¹⁰H.-Y. Song and S.-P. Zhou, Phys. Lett. A **372**, 6773 (2008).
- ¹¹G. Deutscher and D. Feinberg, Appl. Phys. Lett. 76, 487 (2000).
- ¹²X. F. Cao, Y. Shi, X. Song, S. Zhou, and H. Chen, Phys. Rev. B 70, 235341 (2004).
- ¹³J.-F. Feng and S.-J. Xiong, Phys. Rev. B 67, 045316 (2003).
- ¹⁴Y.-X. Li, H.-Y. Choi, H.-W. Lee, and J.-J. Liu, J. Appl. Phys. **101**, 103918 (2007).
- ¹⁵Y. Zhu, Q.-f. Sun, and T. H. Lin, Phys. Rev. B 65, 024516 (2001).
- ¹⁶A. F. Andreev, Zh. Eksp. Teor. Fiz. 46, 1823 (1964) [Sov. Phys.

JETP 19, 1228 (1964)].

- ¹⁷L. Hofstetter, S. Csonka, J. Nygard, and C. Schonenberger, Nature (London) 461, 960 (2009).
- ¹⁸J.-L. Li and Y.-X. Li, J. Phys.: Condens. Matter **20**, 465202 (2008).
- ¹⁹H. Pan and T.-H. Lin, Phys. Rev. B 74, 235312 (2006).
- ²⁰F. S. Bergeret, A. Levy Yeyati, and A. Martín-Rodero, Phys. Rev. B **74**, 132505 (2006).
- ²¹Y.-X. Li, H.-W. Lee, and H.-Y. Choi, Phys. Lett. A **372**, 6424 (2008).
- ²²R. Hornberger, S. Koller, G. Begemann, A. Donarini, and M. Grifoni, Phys. Rev. B 77, 245313 (2008).
- ²³L. V. Keldysh, Zh. Eksp. Teor. Fiz. **47**, 1515 (1964) [Sov. Phys. JETP **20**, 1018 (1965)].
- ²⁴ A.-P. Jauho, N. S. Wingreen, and Y. Meir, Phys. Rev. B 50, 5528 (1994).
- ²⁵J. Rammer and H. Smith, Rev. Mod. Phys. 58, 323 (1986).
- ²⁶L. M. Falicov and R. A. Harris, J. Chem. Phys. 51, 3153 (1969).
- ²⁷K. Ishibashi, M. Suzuki, T. Ida, and Y. Aoyagi, Appl. Phys. Lett. **79**, 1864 (2001).
- ²⁸ W. Song, E. E. Mendez, V. Kuznetsov, and B. Nielsen, Appl. Phys. Lett. **82**, 1568 (2003).
- ²⁹ P. Makk, S. Csonka, and A. Halbritter, Phys. Rev. B 78, 045414 (2008).
- ³⁰J. Fransson and O. Eriksson, Phys. Rev. B 70, 085301 (2004).
- ³¹ J. Fransson and O. Eriksson, J. Phys.: Condens. Matter 16, L85 (2004).
- ³²G. A. Lara, P. A. Orellana, and E. V. Anda, Phys. Rev. B 78, 045323 (2008).

- ³³J. N. Pedersen, B. Lassen, A. Wacker, and M. H. Hettler, Phys. Rev. B **75**, 235314 (2007).
- ³⁴H. W. Liu, T. Fujisawa, T. Hayashi, and Y. Hirayama, Phys. Rev. B **72**, 161305(R) (2005).
- ³⁵V. H. Nguyen, V. L. Nguyen, and P. Dollfus, Appl. Phys. Lett. 87, 123107 (2005).
- ³⁶A. Zazunov, D. Feinberg, and T. Martin, Phys. Rev. B 73, 115405 (2006).
- ³⁷J. Martinek, Y. Utsumi, H. Imamura, J. Barnaś, S. Maekawa, J. König, and G. Schön, Phys. Rev. Lett. **91**, 127203 (2003).

PHYSICAL REVIEW B 81, 094526 (2010)

- ³⁸ J. Martinek, M. Sindel, L. Borda, J. Barnaś, J. König, G. Schön, and J. von Delft, Phys. Rev. Lett. **91**, 247202 (2003).
- ³⁹G. E. Blonder, M. Tinkham, and T. M. Klapwijk, Phys. Rev. B 25, 4515 (1982).
- ⁴⁰R. J. Soulen et al., Science 282, 85 (1998).
- ⁴¹ M. J. M. de Jong and C. W. J. Beenakker, Phys. Rev. Lett. 74, 1657 (1995).
- ⁴²L. L. Chang, L. Esaki, and R. Tsu, Appl. Phys. Lett. 24, 593 (1974).

ArXiv: 1003.3688v1(2010)

A seguir é reproduzido o segundo artigo realizado neste trabalho de doutoramento submetido para publicação no *Physical Review B* (seção *Rapid Communications*). No momento este trabalho encontra-se sob avaliação dos *referees* da revista. Em linhas gerais, este trabalho trata dos resultados para o caso não-interagente do segundo sistema $(F_1, F_2) - PQ_1 - PQ_2 - S$, discutidos no capítulo 5 desta tese. Basicamente são consideradas as propriedades de interesse em aplicações em spintrônica: a mudança de sinal da *ARMR* com o potencial externo e o efeito transistor observado neste sistema.

Magnetoresistance and transistor-like behavior of double quantum dots connected to ferromagnetic and superconductor leads

E. C. Siqueira^{*} and G. G. Cabrera[†]

Instituto de Física 'Gleb Wataghin', UNICAMP, C.P. 6165, Campinas 13083-970, SP, Brazil

(Dated: March 22, 2010)

In this article we have studied electrical current and magnetoresistance of the $(F_1, F_2) - QD_a - QD_b - S$ system. We have found that the signal of the magnetoresistance can be changed through the external potential applied in the ferromagnets. In addition, it is possible to control the current of the first ferromagnet (F_1) through the potential applied in the second one (F_2) . This transistor-like behavior can be useful in future technological applications.

PACS numbers: 73.23Hk, 73.63Kv, 74.45.+c, 74.78Na

The recent advances in the experimental development of nanostructures are mainly aimed at the study of purely quantum phenomena and effects based on electron-spin properties (spintronics). In the special case of systems composed by a ferromagnet and a superconductor it is possible to construct spin valves which control the current flow through these systems. Andreev reflection permits such control, by varying the polarization of the ferromagnet attached to the system, as shown in several papers¹⁻¹⁶. And reev reflection¹⁷ (AR) is a mechanism in which a Cooper pair is formed in the superconductor from the combination of an incident electron coming from the normal metal with energy ω and spin σ , with another electron with energy $-\omega$ and spin $\bar{\sigma}$. Both electrons enter the superconductor as a Cooper pair, leaving a reflecting hole in the ferromagnetic electrode. Andreev states are located within the superconductor gap, where no quasi-particles states are available.

In this work we propose a prototype of a molecular transistor by combining two quantum dots with a superconductor and two ferromagnetic electrodes. A schematic diagram of the system is shown in figure 1. There are two ferromagnetic electrodes, F_1 and F_2 , attached to the first quantum dot and a superconductor electrode is connected to the second one. The dot coupled to the ferromagnetic electrodes (F) is called a, and b is the one coupled to the superconductor (S). The superconductor has its chemical potential fixed to zero, and independent voltage bias are applied to the ferromagnets which are called V_1 and V_2 .

 $+V_{1} - F_{1}$

FIG. 1: (Color Online) Schematic diagram showing the (F_1,F_2) - QD_1 - QD_2 -S system. The magnetization of F_1 is assumed to be fixed and the magnetization of F_2 can be varied for an angle θ with respect to the F_1 magnetization. It is applied external potentials to F_1 and F_2 and the superconductor lead is grounded.

The system displayed in Fig. 1 is described by the following Hamiltonian:

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 + \mathcal{H}_2 + \mathcal{H}_S + \mathcal{H}_{dqd} + \mathcal{H}_T, \tag{1}$$

where $\mathcal{H}_1 = \sum_{k\sigma} (\epsilon_k - \sigma h_1 - \mu_1) a^{\dagger}_{k\sigma} a_{k\sigma}$ is the Hamiltonian of the ferromagnet 1 in which the spin bands are shifted by the exchange energy h_1 . The magnetization of this ferromagnet is fixed to a direction which we call \hat{z} . The ferromagnet 2 is modeled by $\mathcal{H}_2 = \sum_{k\sigma} [\epsilon_k - \operatorname{sgn}(\sigma) h_2 \cos \theta - \mu_2] b^{\dagger}_{k\sigma} b_{k\sigma} - \sum_{k\sigma} h_2 \sin \theta b^{\dagger}_{k\sigma} b_{k\sigma}$ where θ is the angle of the F_2 magnetization with respect to \hat{z} -axis and h_2 is the exchange energy. The superconductor is described by the BCS Hamiltonian: $\mathcal{H}_S = \sum_{p\sigma} \epsilon_p s^{\dagger}_{p\sigma} s_{p\sigma} + \sum_p [\Delta s^{\dagger}_{p\uparrow} s^{\dagger}_{-p\downarrow} + \operatorname{H.c.}]$. The quantum dots are considered noninteracting with one level degenerated in spin $\hat{\mathcal{H}}_{dqd} = \sum_{\sigma} E_{a\sigma} \hat{n}_{a\sigma} + \sum_{\sigma} E_{b\sigma} \hat{n}_{b\sigma}$. The tunneling between the quantum dots and the leads is described by $\mathcal{H}_T = \sum_{k\sigma} [t_1 a^{\dagger}_{k\sigma} c_{a\sigma} + \operatorname{H.c.}] + \sum_{k\sigma} [t_2 b^{\dagger}_{k\sigma} c_{a\sigma} + \operatorname{H.c.}]$.

In order to calculate the transport properties we have used the non-equilibrium Green's function method¹⁸. All the physical quantities can be cast in terms of the Green's function of the dots. By using the Nambu 4×4 notation the retarded Green's functions of the quantum dots are given by:

$$\mathbf{G}_{aa}^{r} = \mathbf{G}_{aa}^{r0} + \mathbf{G}_{aa}^{r} \mathbf{t}_{ab}^{\dagger} \mathbf{G}_{bb}^{r0} \mathbf{t}_{ab} \mathbf{G}_{aa}^{r0}$$
(2)

$$\mathbf{G}_{bb}^{r} = \mathbf{G}_{bb}^{r0} + \mathbf{G}_{bb}^{r} \mathbf{t}_{ab}^{\dagger} \mathbf{G}_{aa}^{r0} \mathbf{t}_{ab} \mathbf{G}_{aa}^{r0}.$$
 (3)

where we have defined: $\mathbf{G}_{aa}^{r0} = \mathbf{g}_{aa}^r (1 - \mathbf{\Sigma}_{F}^r \mathbf{g}_{aa}^r)^{-1}$ and $\mathbf{G}_{bb}^{r0} = \mathbf{g}_{bb}^r (1 - \mathbf{\Sigma}_{S}^r \mathbf{g}_{bb}^r)^{-1}$.

In these equations \mathbf{G}_{aa}^r is the Green's function of the quantum dot a; \mathbf{G}_{bb}^r is the Green's function of the quantum dot b; \mathbf{g}_{aa}^r and \mathbf{g}_{bb}^r are the Green's functions of the dots a and b isolated from the electrodes; \mathbf{t}_{ab} describes the coupling between the dots; $\mathbf{\Sigma}_F^r = \mathbf{\Sigma}_1^r + \mathbf{\Sigma}_2^r$ and $\mathbf{\Sigma}_S^r$ are the retarded self-energies which describe the coupling of the dots with the ferromagnetic and superconductor electrodes, respectively. Explicitly these self-energies are

written as,

$$\boldsymbol{\Sigma}_{F}^{r,a}(\omega) = \mp \frac{i}{2} \begin{bmatrix} A_{\uparrow} & 0 & B & 0\\ 0 & A_{\downarrow} & 0 & B\\ B & 0 & A_{\downarrow} & 0\\ 0 & B & 0 & A_{\uparrow} \end{bmatrix}, \quad (4)$$

with $A_{\sigma} \equiv \Gamma_{1\sigma} + c^2 \Gamma_{2\sigma} + s^2 \Gamma_{2\bar{\sigma}}$, $B = sc(\Gamma_{2\uparrow} - \Gamma_{2\downarrow})$, $s \equiv \sin \theta/2$ and $c \equiv \cos \theta/2$. We also have defined $\Gamma_{i\sigma} = 2\pi |t_i|^2 N_{i\sigma}$, (with i = 1, 2) as the coupling strength, with t_i being the tunneling amplitude and $N_{i\sigma}$ the density of states for the ferromagnet spin σ band.

The retarded/advanced self-energy of the superconductor is given by,

$$\Sigma_{S}^{r,a}(\omega) = \mp \frac{i}{2} \Gamma_{s} \rho(\omega) \begin{bmatrix} 1 & -\Delta/\omega & 0 & 0\\ -\Delta/\omega & 1 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 1 & \Delta/\omega\\ 0 & 0 & \Delta/\omega & 1 \end{bmatrix},$$
(5)

where $\Gamma_s = 2\pi |t_s|^2 N_s$, with N_s being the density of states of the superconductor in the normal state and ρ is the modified BCS density of states $\rho(\omega) \equiv \frac{|\omega|\theta(|\omega| - \Delta)}{\sqrt{\omega^2 - \Delta^2}} + \frac{\omega\theta(\Delta - |\omega|)}{i\sqrt{\Delta^2 - \omega^2}}$, with the imaginary part accounting for An-

dreev states within the gap^{19} .

Besides the retarded and advanced Green's functions, it is necessary to obtain the "lesser" Green's functions for the quantum dots, which are obtained through the Keldysh equation. By using the equation of motion technique we can obtain an exact self-energy expression which allows us to write for the dot *a*:

$$\mathbf{G}_{aa}^{<}(\omega) = \mathbf{G}_{aa}^{r}(\omega) \mathbf{\Sigma}_{Ta}^{<}(\omega) \mathbf{G}_{aa}^{a}(\omega), \qquad (6)$$

with the "lesser" self-energy $\Sigma_{Ta}^{<}$:

$$\boldsymbol{\Sigma}_{Ta}^{<}(\omega) = \boldsymbol{\Sigma}_{F}^{<}(\omega) + \mathbf{t}_{ab}^{\dagger} \mathbf{G}_{bb}^{r0} \boldsymbol{\Sigma}_{S}^{<}(\omega) \mathbf{G}_{bb}^{a0}(\omega) \mathbf{t}_{ab}.$$
 (7)

Correspondingly, the Keldysh equation for quantum dot b is given by:

$$\mathbf{G}_{bb}^{<}(\omega) = \mathbf{G}_{bb}^{r}(\omega) \mathbf{\Sigma}_{Tb}^{<}(\omega) \mathbf{G}_{bb}^{a}(\omega), \qquad (8)$$

with the "lesser" self-energy $\Sigma_{Th}^{<}$:

$$\boldsymbol{\Sigma}_{Tb}^{<}(\omega) = \boldsymbol{\Sigma}_{S}^{<}(\omega) + \mathbf{t}_{ab}^{\dagger} \mathbf{G}_{aa}^{r0} \boldsymbol{\Sigma}_{F}^{<}(\omega) \mathbf{G}_{aa}^{a0}(\omega) \mathbf{t}_{ab}.$$
 (9)

In the equations (6) through (9) the "lesser" selfenergies $\Sigma_F^{<} = \Sigma_1^{<} + \Sigma_2^{<}$ and $\Sigma_S^{<}$ are obtained by the fluctuation-dissipation theorem $\Sigma_i^{<} = \mathbf{F}_i(\omega)[\Sigma_i^a - \Sigma_i^r]$, where i = 1, 2 or s. The Fermi matrix \mathbf{F}_i is given by,

$$\mathbf{F}_{i}(\omega) = \begin{bmatrix} f_{i} & 0 & 0 & 0\\ 0 & \bar{f}_{i} & 0 & 0\\ 0 & 0 & f_{i} & 0\\ 0 & 0 & 0 & \bar{f}_{i} \end{bmatrix}$$
(10)

in which the Fermi functions are defined as $f_i = f(\omega - eV_i)$ and $\bar{f}_i = (\omega + eV_i)$ for i = 1, 2 and $f_i = f(\omega)$ if i = s. The electrical current can be calculated as the number variation in any point of the circuit. Here we choose the variation at the ferromagnet electrodes such as $I_i = -e \left\langle \frac{dN_i}{dt} \right\rangle$ with i = 1, 2. The total current is given by the sum of the current from the electrode F_1 and the electrode F_2 , i.e., $I = I_1 + I_2$. The final result is:

$$I = \frac{e}{h} \int d\omega [A_{11}(f_1 - \bar{f}_1) + A_{12}(f_1 - \bar{f}_2) + A_{22}(f_2 - \bar{f}_2) + A_{21}(f_2 - \bar{f}_1) \quad (11)$$

$$\begin{split} \mathbf{A}_{11} &= \Gamma_{1\uparrow} \left(|G_{aa,14}^r|^2 \Gamma_{1\uparrow} + |G_{aa,12}^r|^2 \Gamma_{1\downarrow} \right) \\ &+ \Gamma_{1\downarrow} \left(|G_{aa,34}^r|^2 \Gamma_{1\uparrow} + |G_{aa,32}^r|^2 \Gamma_{1\downarrow} \right) \end{split}$$

$$\begin{split} A_{12} &= \Gamma_{1\uparrow} \left[(c^2 \Gamma_{2\uparrow} + s^2 \Gamma_{2\downarrow}) |G^r_{aa,14}|^2 + (s^2 \Gamma_{2\uparrow} + c^2 \Gamma_{2\downarrow}) |G^r_{aa,12}|^2 \\ &+ sc(\Gamma_{2\uparrow} - \Gamma_{2\downarrow}) [G^r_{aa,12}]^* G^r_{aa,14} + sc(\Gamma_{2\uparrow} - \Gamma_{2\downarrow}) [G^r_{aa,14}]^* G^r_{aa} \\ &+ \Gamma_{1\downarrow} \left[(c^2 \Gamma_{2\uparrow} + s^2 \Gamma_{2\downarrow}) |G^r_{aa,34}|^2 + (s^2 \Gamma_{2\uparrow} + c^2 \Gamma_{2\downarrow}) |G^r_{aa,32}|^2 \\ &+ sc(\Gamma_{2\uparrow} - \Gamma_{2\downarrow}) [G^r_{aa,32}]^* G^r_{aa,34} + sc(\Gamma_{2\uparrow} - \Gamma_{2\downarrow}) [G^r_{aa,34}]^* G^r_{aa} \end{split}$$

$$\begin{split} A_{22} &= \left(\Gamma_{2\uparrow}c^{2} + s^{2}\Gamma_{2\downarrow}\right)^{2} |G_{aa,14}^{r}|^{2} + c^{2}s^{2} \left(G_{aa,34}^{r}[G_{aa,12}^{r}]^{*} \\ &+ [G_{aa,34}^{r}]^{*}G_{aa,12}^{r} + G_{aa,14}^{r}[G_{aa,32}^{r}]^{*} + [G_{aa,14}^{r}]^{*}G_{aa,32}^{r}\right) \left(\Gamma_{2\downarrow} \\ &+ |G_{aa,32}^{r}|^{2} \left(\Gamma_{2\downarrow}c^{2} + s^{2}\Gamma_{2\uparrow}\right)^{2} \\ &+ \left(|G_{aa,12}^{r}|^{2} + |G_{aa,34}^{r}|^{2}\right) \left(\Gamma_{2\uparrow}c^{2} + s^{2}\Gamma_{2\downarrow}\right) \left(\Gamma_{2\downarrow}c^{2} + s^{2}\Gamma_{2\uparrow}\right) + \\ &+ cs \left(\Gamma_{2\uparrow} - \Gamma_{2\downarrow}\right) \left\{ \left(G_{aa,14}^{r}[G_{aa,12}^{r}]^{*} + [G_{aa,14}^{r}]^{*}G_{aa,12}^{r} \\ &+ (G_{aa,34}^{r}]^{*} + [G_{aa,34}^{r}]^{*} + [G_{aa,34}^{r}] \left(\Gamma_{2\uparrow}c^{2} + s^{2}\Gamma_{2\downarrow}\right) \right) \\ &+ \left(G_{aa,32}^{r}[G_{aa,34}^{r}]^{*} + [G_{aa,32}^{r}]^{*}G_{aa,34}^{r}\right) \left(\Gamma_{2\downarrow}c^{2} + s^{2}\Gamma_{2\downarrow}\right) \right\}, \end{split}$$

$$\begin{split} A_{21} &= \Gamma_{1\downarrow} \left[\left(\Gamma_{2\uparrow} c^2 + s^2 \Gamma_{2\downarrow} \right) |G^r_{aa,12}|^2 \\ &+ cs \left(G^r_{aa,32} [G^r_{aa,12}]^* + [G^r_{aa,32}]^* G^r_{aa,12} \right) \left(\Gamma_{2\uparrow} - \Gamma_{2\downarrow} \right) \\ &+ |G^r_{aa,32}|^2 \left(\Gamma_{2\downarrow} c^2 + s^2 \Gamma_{2\uparrow} \right) \right] + \\ &+ \Gamma_{1\uparrow} \left[\left(\Gamma_{2\uparrow} c^2 + s^2 \Gamma_{2\downarrow} \right) |G^r_{aa,14}|^2 + cs \left(G^r_{aa,34} [G^r_{aa,14}]^* \right) \\ &+ [G^r_{aa,34}]^* G^r_{aa,14} \right) \left(\Gamma_{2\uparrow} - \Gamma_{2\downarrow} \right) + |G^r_{aa,34}|^2 \left(\Gamma_{2\downarrow} c^2 + s^2 \Gamma_{2\uparrow} \right) \end{split}$$

The current is composed by four contributions which can be interpreted as discussed by the reference 20. The terms $A_{11}(f_1 - \bar{f}_1)$ and $A_{22}(f_2 - \bar{f}_2)$ represent the direct AR in the electrodes F_1 and F_2 , respectively; $A_{12}(f_1 - \bar{f}_2)$ represents the crossed Andreev reflection (CAR) of an electron of F_1 as a hole of F_2 . The term $A_{21}(f_2 - \bar{f}_1)$ represents a similar process for an electron of F_2 as a hole of F_1 .

The magnetoresistance of the system is defined as,

$$ARMR = \frac{|I_{AP}| - |I_P|}{|I_{AP}| + |I_P|}$$
(12)

2



FIG. 2: (Color Online) ARMR, I_P and I_{AP} curves. (a), (b) and (c): $\Gamma_1 = \Gamma_2 = 0.50$; (d), (e) and (f): $\Gamma_1 = 0.20$ and $\Gamma_2 = 0.80$. Fixed parameters: $\Gamma_s = 0.30$, $t_{ab} = 0.20$, $P_1 = P_2 = 0.95$, $k_BT = 0.01$. All the parameters are expressed in superconductor gap units.

in which $I_{AP} = I(\theta = \pi)$ and $I_P = I(\theta = 0)$.

The definition (12) is different from the usual since we use the absolute value of the currents. This definition allows us to compare the amplitude of the currents in terms of the bias of each electrode. In this system the current is conducted by crossed Andreev reflections, as a result, the sign of current in each ferromagnetic terminal is linked to the averaged chemical potential of the two leads. Thus, it contains the case that $V_1 > 0$ and $V_2 < 0$ but I > 0. Therefore, by using the definition (12) we can define which current is larger through the signal of ARMR even in the cases where we consider the dependence of ARMR with the bias V_1 or V_2 .

In the figure 2 we consider the dependence of the ARMR with V_1 for different values of V_2 . The corresponding I_P and I_{AP} curves are also shown. We analyze the influence of the symmetry of the coupling with the ferromagnets.

It can be observed from the figures 2b and 2e that Γ_1 limits the amplitude of the current I_P and Γ_2 shifts I_P on the current axis. On the other hand, by comparing the figures 2c and 2f, we note that the current I_{AP} is almost independent on the relation between Γ_1 and Γ_2 . This is explained by the value of the polarization, which is equal to 0.95 for both electrodes. In this case the total current is almost carried by the CAR, which picks up one spin-up electron from F_1 and another spin-down electron from F_2 . Since the total current must be unpolarized by the superconductor, it is limited by the electrode with low injection of electrons. Therefore, the global behavior of the magnetoresistance follows the variations of the current I_{P} .

3

From the definition (12), the current $I_{AP} > I_P$ corresponds to positive values of ARMR. When the polarization is close to unity, the usual situation is to find positive values of ARMR since the current I_{AP} is carried by the CAR besides the direct AR, which is the only channel available to carry the current I_P . In fact, as shown in figure 2a, the ARMR curve for $\Gamma_1 = \Gamma_2$ is positive for all values of the bias. For the curves with $V_2 \neq 0$ there are two peaks, localized at $V_1 \approx \pm 0.22$, corresponding to the value where I_{AP} is close to zero.

In figure 2d is shown the ARMR curves for $\Gamma_2 > \Gamma_1$. When $V_2 = 0$ the ARMR is almost constant for all values of V_1 . For $V_2 > 0$ the ARMR displays a step-like behavior with positive values for $V_1 > 0$ and negative values for $V_1 < 0$. If we change the sign of V_2 we have the opposite case, i.e, ARMR > 0 for $V_1 < 0$ and ARMR < 0 for $V_1 > 0$. The results shown in figure 2 indicate that one can control the sign of the magnetoresistance of the system through external parameters (V_1 and V_2) when the coupling of F_1 and F_2 with the dot a are different from each other.

The curves for I_{AP} , shown in figures 2c and 2f, display some interesting features. Unlike the current I_P , the shift of I_{AP} along the current axis is related with the bias rather than the coupling constants Γ_1 and Γ_2 . In fact, the high polarization values $P_1 = P_2 = 0.95$ reduce the



FIG. 3: (Color Online) Current through the terminal F_1 for $V_2 = -0.30$ (red curve) and $V_2 = 0.30$ (black curve). Fixed parameters: $\Gamma_1 = 0.20$, $\Gamma_2 = 0.80$, $\Gamma_s = 0.80$, $t_{ab} = 0.20$, $P_1 = P_2 = 0.95$, $V_2 = 0.30$, $k_BT = 0.01$. All the parameters are expressed in superconductor gap units.

contribution from the direct AR and the current I_{AP} is dominated by the CAR process. In order to clarify this point we consider the current formula (11) in the case of zero temperature, where the Fermi functions become step functions. If we also neglect the direct AR, $I(V_1, V_2)$ can be written as,

$$I(V_1, V_2) = \frac{e}{h} \int_{-V_2}^{+V_1} [A_{12}(\omega) + A_{21}(-\omega)] \, d\omega \qquad (13)$$

which implies that the current tends to zero when $V_1 \rightarrow$ $-V_2$. This condition determines the shifts of the current I_{AP} when we change the value of the bias in the electrode F_2 . This can be seen from the curves shown in figures 2c and 2f. The fact that some regions of the bias present zero current values can be useful in practical applications since the currents at each electrode can be spin pure in the antiferromagnetic configuration. To illustrate this point we show in figure 3, the current curves in the electrode F_1 , namely $I_{1,AP}$, corresponding to the case shown in figure 2f for $V_2 = \pm 0.30$. Since the polarization of the electrodes is close to unity, and the ferromagnets are in the antiparallel configuration, the current through the ferromagnet F_1 is composed almost by spin-up electrons. When the absolute value of the bias is larger than 0.4(out of the shaded region) the system works as a switch: if we change the bias in F_2 from zero to ± 0.30 we can commute the current through the F_1 from zero to the maximum value. Thus, we can control a spin current in one electrode by changing the bias in the other electrode. This can be useful in practical applications of spintronics since the system behaves as a transistor. This effect works better in high values of the polarization where the CAR is the principal mechanism of transport.

In this work we have studied the magnetoresistance and the current properties of the $(F_1, F_2)-QD_a-QD_b-S$ system. We have shown that the magnetoresistance signal can be switched by applying an external potential in one of the ferromagnetic leads. In addition, the current carried by CAR can be also controlled through the potential of the ferromagnets which characterizes the system as a transistor.

This work was supported by the Brazilian agency Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq).

- * Electronic address: ecosta@ifi.unicamp.br
- [†] Electronic address: cabrera@ifi.unicamp.br
- ¹ W. G. van der Wiel, S. De Franceschi, J. M. Elzerman, T. Fujisawa, S. Tarucha, and L. P. Kouwenhoven, Rev. Mod. Phys. **75**, 1 (2002).
- ² I. Žutić, J. Fabian, and S. Das Sarma, Rev. Mod. Phys. 76, 323 (2004).
- ³ R. Hanson, L. P. Kouwenhoven, J. R. Petta, S. Tarucha, and L. M. K. Vandersypen, Rev. Mod. Phys. **79**, 1217 (2007).
- ⁴ S. D. Sarma, J. Fabian, X. Hu, and I. Zutic, Solid State Comm. **119**, 207 (2001).
- ⁵ Z. Chen, B. Wang, D. Y. Xing, and J. Wang, Appl. Phys. Lett. 85, 2553 (2004).
- ⁶ Q.-f. Sun, J. Wang, and T. H. Lin, Phys. Rev. B **59**, 3831 (1999).
- ⁷ L. Hofstetter, S. Csonka, J. Nygard, and C. Schonenberger, Nature 461, 960 (2009).
- ⁸ J.-L. Li and Y.-X. Li, J. Phys.: Condens. Matter 20, 465202 (2008).
- ⁹ Y.-X. Li, H.-Y. Choi, H.-W. Lee, and J.-J. Liu, J. Appl.

Phys. 101, 103918 (2007).

- ¹⁰ H. Pan and T.-H. Lin, Phys. Rev. B **74**, 235312 (2006).
- ¹¹ F. S. Bergeret, A. Levy Yeyati, and A. Martín-Rodero, Phys. Rev. B **74**, 132505 (2006).
- ¹² Y.-X. Li, H.-W. Lee, and H.-Y. Choi, Phys. Lett. A 372, 6424 (2008).
- ¹³ R. Hornberger, S. Koller, G. Begemann, A. Donarini, and M. Grifoni, Phys. Rev. B 77, 245313 (2008).
- ¹⁴ J.-F. Feng, X.-S. Wu, and S.-S. Jiang, J. Appl. Phys. 99, 08F713 (2006).
- ¹⁵ Z. Chen, B. Wang, D. Y. Xing, and J. Wang, Applied Physics Letters 85, 2553 (2004).
- ¹⁶ X. F. Cao, Y. Shi, X. Song, S. Zhou, and H. Chen, Phys. Rev. B **70**, 235341 (2004).
- ¹⁷ A. F. Andreev, Sov. Phys. JETP **19**, 1228 (1964).
- ¹⁸ J. Rammer and H. Smith, Rev. Mod. Phys. 58, 323 (1986).
- ¹⁹ Z. Y. Zeng, B. Li, and F. Claro, Phys. Rev. B 68, 115319 (2003).
- ²⁰ Y. Zhu, Q.-f. Sun, and T. H. Lin, Phys. Rev. B 65, 024516 (2001).

4

Referências Bibliográficas

- [1] Zutić, I., Fabian, J., and Das Sarma, S., Rev. Mod. Phys. 76 (2004) 323.
- [2] Hanson, R., Kouwenhoven, L. P., Petta, J. R., Tarucha, S., and Vandersypen, L. M. K., Reviews of Modern Physics 79 (2007) 1217.
- [3] Likharev, K. K., Rev. Mod. Phys. **51** (1979) 101.
- [4] de Gennes, P. G., Rev. Mod. Phys. **36** (1964) 225.
- [5] Giaever, I., Rev. Mod. Phys. 46 (1974) 245.
- [6] Golubov, A. A., Kupriyanov, M. Y., and Il'ichev, E., Rev. Mod. Phys. 76 (2004) 411.
- [7] Meissner, H., Phys. Rev. **117** (1960) 672.
- [8] Saint-James, D., J. Phys. France **25** (1964) 899.
- [9] Andreev, A. F., Sov. Phys. JETP **19** (1964) 1228.
- [10] Pannetier, B. and Courtois, H., Journal of low temperature physics 118 (2000) 599.
- [11] Deutscher, G., Rev. Mod. Phys. 77 (2005) 109.
- [12] Zagoskin, A. M., Quantum Theory of Many-Body Systems, Springer, 1998.
- [13] Beenakker, C. J. W., cond-mat/9909293v2 (1999).
- [14] Kroemer, H. and Thomas, M., Superlattices and Microstructures 21 (1997) 61.
- [15] Kleinsasser, A. W., Miller, R. E., Mallison, W. H., and Arnold, G. B., Phys. Rev. Lett. 72 (1994) 1738.
- [16] van der Post, N., Peters, E. T., Yanson, I. K., and van Ruitenbeek, J. M., Phys. Rev. Lett.
 73 (1994) 2611.

- [17] Takagaki, Y. and Takayanagi, H., Phys. Rev. B 53 (1996) 14530.
- [18] Takayanagi, H., Akazaki, T., and Nitta, J., Phys. Rev. Lett. 75 (1995) 3533.
- [19] Yeyati, A. L., Martin-Rodero, A., and Cuevas, J. C., Journal of Physics: Condensed Matter 8 (1996) 449.
- [20] Agraït, N., Yeyati, A. L., and van Ruitenbeek, J. M., Physics Reports 377 (2003) 81.
- [21] Kastalsky, A. et al., Phys. Rev. Lett. 67 (1991) 3026.
- [22] Kleinsasser, A. W. and Kastalsky, A., Phys. Rev. B 47 (1993) 8361.
- [23] Bakker, S. J. M., Jaeger, H. M., Klapwijk, T. M., van der Drift, E., and Radelaar, S., Phys. Rev. B 48 (1993) 4168.
- [24] Hanke, U. et al., Phys. Rev. B **51** (1995) 9084.
- [25] Amar, A., Song, D., Lobb, C. J., and Wellstood, F. C., Phys. Rev. Lett. 72 (1994) 3234.
- [26] Hergenrother, J. M., Tuominen, M. T., and Tinkham, M., Phys. Rev. Lett. 72 (1994) 1742.
- [27] Tuominen, M. T., Hergenrother, J. M., Tighe, T. S., and Tinkham, M., Phys. Rev. B 47 (1993) 11599.
- [28] Tuominen, M. T., Hergenrother, J. M., Tighe, T. S., and Tinkham, M., Phys. Rev. Lett. 69 (1992) 1997.
- [29] Hekking, F. W. J., Glazman, L. I., Matveev, K. A., and Shekhter, R. I., Phys. Rev. Lett. 70 (1993) 4138.
- [30] Eiles, T. M., Martinis, J. M., and Devoret, M. H., Phys. Rev. Lett. 70 (1993) 1862.
- [31] Ralph, D. C., Black, C. T., and Tinkham, M., Phys. Rev. Lett. 74 (1995) 3241.
- [32] Yeyati, A. L., Cuevas, J. C., López-Dávalos, A., and Martín-Rodero, A., Phys. Rev. B 55 (1997) R6137.
- [33] Ishizaka, S., Sone, J., and Ando, T., Phys. Rev. B 52 (1995) 8358.
- [34] Fazio, R. and Raimondi, R., Phys. Rev. Lett. 80 (1998) 2913.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [35] Soulen, R. J., J. et al., Science **282** (1998) 85.
- [36] de Jong, M. J. M. and Beenakker, C. W. J., Phys. Rev. Lett. **74** (1995) 1657.
- [37] Beckmann, D., Weber, H. B., and v. Löhneysen, H., Phys. Rev. Lett. 93 (2004) 197003.
- [38] Lyuksyutov, I. F. and Pokrovsky, V. L., Advances in Physics 54 (2005) 67.
- [39] Buzdin, A. I., Rev. Mod. Phys. **77** (2005) 935.
- [40] Deutscher, G. and Feinberg, D., Applied Physics Letters 76 (2000) 487.
- [41] Russo, S., Kroug, M., Klapwijk, T. M., and Morpurgo, A. F., Phys. Rev. Lett. 95 (2005) 027002.
- [42] Cadden-Zimansky, P. and Chandrasekhar, V., Phys. Rev. Lett. 97 (2006) 237003.
- [43] Cadden-Zimansky, P., Jiang, Z., and Chandrasekhar, V., New Journal of Physics 9 (2007) 116.
- [44] Asulin, I., Yuli, O., Koren, G., and Millo, O., Phys. Rev. B 74 (2006) 092501.
- [45] Morten, J. P., Brataas, A., and Belzig, W., Phys. Rev. B 74 (2006) 214510.
- [46] Benjamin, C., Phys. Rev. B **74** (2006) 180503.
- [47] Mélin, R. and Peysson, S., Phys. Rev. B 68 (2003) 174515.
- [48] Giazotto, F., Taddei, F., Beltram, F., and Fazio, R., Phys. Rev. Lett. 97 (2006) 087001.
- [49] Deutscher, G., Journal of Superconductivity 15 (2002) 43.
- [50] Mélin, R., Phys. Rev. B **72** (2005) 054503.
- [51] Benjamin, C. and Citro, R., Phys. Rev. B **72** (2005) 085340.
- [52] Chen, Z., Wang, B., Xing, D. Y., and Wang, J., Applied Physics Letters 85 (2004) 2553.
- [53] Cao, X., Shi, Y., Song, X., Zhou, S., and Chen, H., Phys. Rev. B 70 (2004) 235341.
- [54] Feng, J.-F. and Xiong, S.-J., Phys. Rev. B 67 (2003) 045316.
- [55] Zhu, Y., Sun, Q.-f., and Lin, T.-h., Phys. Rev. B 65 (2001) 024516.

- [56] Dolcini, F. and Dell'Anna, L., Phys. Rev. B 78 (2008) 024518.
- [57] Song, H.-Y. and Zhou, S.-P., Physics Letters A 372 (2008) 6773.
- [58] Brinkman, A. and Golubov, A. A., Phys. Rev. B 74 (2006) 214512.
- [59] Lambert, C. J., Journal of Physics-Condensed Matter 3 (1991) 6579.
- [60] Lesovik, G. B., Martin, T., and Blatter, G., European Physical Journal B 24 (2001) 287.
- [61] Sauret, O., Martin, T., and Feinberg, D., Phys. Rev. B 72 (2005) 024544.
- [62] Sauret, O. and Feinberg, D., Phys. Rev. Lett. **92** (2004) 106601.
- [63] Simon, P. and Feinberg, D., Phys. Rev. Lett. 97 (2006) 247207.
- [64] Bignon, G., Houzet, M., Pistolesi, F., and Hekking, F. W. J., EPL (Europhysics Letters) 67 (2004) 110.
- [65] Zeng, Z. Y., Zhou, L., Hong, J., and Li, B., Phys. Rev. B 74 (2006) 085312.
- [66] van der Wiel, W. G. et al., Rev. Mod. Phys. **75** (2002) 1.
- [67] Sun, Q.-f. and Guo, H., Phys. Rev. B 66 (2002) 155308.
- [68] Aono, T. and Eto, M., Phys. Rev. B 63 (2001) 125327.
- [69] Aguado, R. and Langreth, D. C., Phys. Rev. B 67 (2003) 245307.
- [70] Ji, T., Sun, Q., and Guo, H., Phys. Rev. B 74 (2006) 233307.
- [71] Kim, T.-S. and Hershfield, S., Phys. Rev. B 63 (2001) 245326.
- [72] Li, Y.-X., Choi, H.-Y., Lee, H.-W., and Liu, J.-J., Journal of Applied Physics 101 (2007) 103918.
- [73] Zhang, Z.-Y., Journal of Physics: Condensed Matter 18 (2006) 181.
- [74] Buitelaar, M. R., Nussbaumer, T., and Schönenberger, C., Phys. Rev. Lett. 89 (2002) 256801.
- [75] Buitelaar, M. R. et al., Phys. Rev. Lett. **91** (2003) 057005.
- [76] Tanaka, Y., Kawakami, N., and Oguri, A., Phys. Rev. B 78 (2008) 035444.

- [77] Tanaka, Y., Kawakami, N., and Oguri, A., Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures 40 (2008) 1618, 17th International Conference on Electronic Properties of Two-Dimensional Systems.
- [78] Keldysh, L. V., JETP **20** (1965) 1018.
- [79] Kadanoff, L. and Baym, G., Quantum Statistical Mechanics, Benjammim, Inc., 1962.
- [80] Haug, H. and Jauho, A. P., Quantum Kinetics in Transport and Optics of Semiconductor, Springer, Heidelberg, 1996.
- [81] Ventra, M. D., Electrical Transport in Nanoscale Systems, Cambridge University Press, New York, 2008.
- [82] Datta, S., Quantum Transport: Atom to Transistor, Cambridge, New York, 2005.
- [83] Datta, S., Quantum Transport in mesoscopic systems, Cambridge, New York, 1995.
- [84] Nazarov, Y. and Blanter, Y. M., Quantum Transport: Introduction to nanoscience, Cambridge, New York, 2009.
- [85] Ferry, D. K., Goodnick, S. M., and Bird, J., Transport in Nanostructures, Cambridge, New York, 2^o edition, 2009.
- [86] Mahan, G. D., Many Particle Physics, Third Edition, Plenum, New York, 2000.
- [87] Rammer, J. and Smith, H., Rev. Mod. Phys. 58 (1986) 323.
- [88] Anderson, P. W., Phys. Rev. **124** (1961) 41.
- [89] Fazekas, P., Lecture notes on Electron Correlations and Magnetism, World Scientific, Singapore, 1999.
- [90] Bardeen, J., Cooper, L. N., and Schrieffer, J. R., Phys. Rev. 106 (1957) 162.
- [91] Slonczewski, J. C., Phys. Rev. B **39** (1989) 6995.
- [92] Zeng, Z., Li, B., and Claro, F., The European Physical Journal B Condensed Matter and Complex Systems 32 (2003).
- [93] Nambu, Y., Phys. Rev. **117** (1960) 648.

- [94] Martinek, J. et al., Phys. Rev. Lett. **91** (2003) 127203.
- [95] Martinek, J. et al., Phys. Rev. Lett. **91** (2003) 247202.
- [96] Bergeret, F. S., Yeyati, A. L., and Martín-Rodero, A., Phys. Rev. B 74 (2006) 132505.
- [97] Baibich, M. N. et al., Phys. Rev. Lett. **61** (1988) 2472.
- [98] Prinz, G. A., Physics Today 48 (1995) 58.
- [99] Doh, Y.-J., Franceschi, S. D., Bakkers, E. P. A. M., and Kouwenhoven, L. P., Nano Letters 8 (2008) 4098.
- [100] Nguyen, V. H., Nguyen, V. L., and Nguyen, H. N., Journal of Applied Physics 96 (2004) 3302.
- [101] Fransson, J. and Eriksson, O., Phys. Rev. B 70 (2004) 085301.
- [102] Fransson, J. and Eriksson, O., J. Phys.: Condens. Matter 16 (2004) L85.
- [103] Lara, G. A., Orellana, P. A., and Anda, E. V., Phys. Rev. B 78 (2008) 045323.
- [104] Aguado, R. and Langreth, D. C., Phys. Rev. Lett. 85 (2000) 1946.
- [105] Rakshit, T., Liang, G.-C., Ghosh, A. W., and Datta, S., Nano Letters 4 (2004) 1803.
- [106] Makk, P., Csonka, S., and Halbritter, A., Phys. Rev. B 78 (2008) 045414.
- [107] Blonder, G. E., Tinkham, M., and Klapwijk, T. M., Phys. Rev. B 25 (1982) 4515.