

Rafael Alves Batista

**EMARANHAMENTO MEDIADO POR CAOS
EM UM PONTO QUÂNTICO ABERTO VIA
FORMALISMO DE KELDYSH**

João Pessoa - PB

2019

Rafael Alves Batista

EMARANHAMENTO MEDIADO POR CAOS EM UM PONTO QUÂNTICO ABERTO VIA FORMALISMO DE KELDysh

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física do Departamento de Física, Centro de Ciências Exatas e da Natureza, Universidade Federal da Paraíba, como requisito parcial para obtenção do título de Mestre em Física, área de concentração Matéria Condensada.

Universidade Federal da Paraíba

Centro de Ciências Exatas e da Natureza

Programa de Pós-Graduação Stricto Sensu em Física

Orientador: Jorge Gabriel Gomes de Souza Ramos

João Pessoa - PB

2019

Catálogo na publicação
Seção de Catalogação e Classificação

B333e Batista, Rafael Alves.

Emaranhamento mediado por caos em um ponto quântico
aberto via formalismo de Keldysh / Rafael Alves

Batista. - João Pessoa, 2019.

99 f. : il.

Orientação: Jorge Gabriel Gomes de Souza Ramos.
Dissertação (Mestrado) - UFPB/CCEN.

1. Física da matéria condensada. 2. Pontos quânticos
caóticos. 3. Ruído. 4. Emaranhamento quântico. 5.
Desigualdade de Bell. 6. Formalismo de Keldysh. I.
Ramos, Jorge Gabriel Gomes de Souza. II. Título.

UFPB/BC

CDU 538.9(043)

Ata da Sessão Pública da Defesa de Dissertação de
Mestrado do aluno **Rafael Alves Batista**, candidato
ao Título de Mestre em Física na Área de
Concentração Física da Matéria Condensada.

Aos trinta e um dias do mês de julho do ano de dois mil e dezenove, às 10:00, reuniram-se, remotamente, os membros da Banca Examinadora constituída para examinar o candidato ao grau de Mestre em Física na área de Física da Matéria Condensada, **Rafael Alves Batista**. A comissão examinadora composta pelos professores doutores: Jorge Gabriel Gomes de Souza Ramos (DF/UFPB), orientador e presidente da banca examinadora, Roberto Menezes da Silva (DF/UFPB) e Ailton Fernandes de Macêdo Júnior (UFRPE). Dando início aos trabalhos, o Prof. Jorge Gabriel Gomes de Souza Ramos comunicou aos presentes a finalidade da reunião. A seguir, passou a palavra o candidato para que o mesmo fizesse, oralmente, a exposição do trabalho de dissertação intitulado “*Emaranhamento mediado por caos em um ponto quântico aberto via formalismo de Keldysh*”. Concluída a exposição, o candidato foi arguido pela Banca Examinadora que emitiu o seguinte parecer: “**aprovado**”. Assim sendo, deve a Universidade Federal da Paraíba expedir o respectivo diploma de Mestre em Física na forma da lei. E para constar, eu, José Sérgio Trindade Silva, lavrei esta ata que vai assinada por mim e pelos membros da Banca Examinadora. João Pessoa, **31 de julho de 2019**.

Prof. Dr. Jorge Gabriel Gomes de Souza Ramos

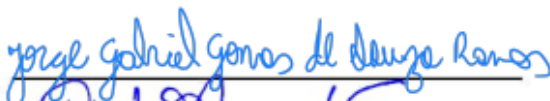
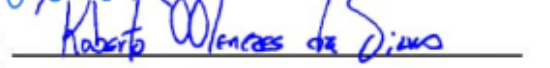
Orientador - UFPB

Prof. Dr. Roberto Menezes da Silva

UFPB

Prof. Dr. Ailton Fernandes de Macêdo Júnior

UFRPE


Link da reunião:



Universidade Federal da Paraíba
Centro de Ciências Exatas e da Natureza
Programa de Pós-Graduação *Stricto Sensu* em Física

DECLARAÇÃO
Participação em Banca

Declaro, para os devidos fins constantes dos arquivos desta Secretaria, ter a Banca Examinadora da Dissertação de Mestrado do aluno Rafael Alves Batista, intitulada “*Emaranhamento mediado por caos em um ponto quântico aberto via formalismo de Keldysh*” e defendida no dia 31 de julho de 2019, às 10:00 horas, de forma remota, sido formada pelos seguintes professores:

Nome	Instituição
Jorge Gabriel Gomes de Souza Ramos (orientador)	UFPB
Roberto Menezes da Silva	UFPB
Ailton Fernandes de Macêdo Júnior	UFRPE

João Pessoa, 31 de julho de 2019.

Campus I – Jardim
Universitário

Fone: 083-3216-7422

João Pessoa-PB, Brasil

<http://www.fisica.ufpb.br>

CEP: 58051-900

secpos@fisica.ufpb.br



Universidade Federal da Paraíba
Centro de Ciências Exatas e da Natureza
Programa de Pós-Graduação *Stricto Sensu* em Física

ATAS E DECLARAÇÕES DE DEFESA

Aluno: **Rafael Alves Batista**

Nível: Mestrado

Orientador: Jorge Gabriel Gomes de Souza Ramos

Data: 31/07/2019, 10:00

Dedico este trabalho primeiramente a Deus, Aquele que tem a primazia em todas as coisas.

À minha família, por ser a base da minha vida.

Agradecimentos

Primeiramente agradeço a Deus por ter me sustentado neste período com saúde e paz e por ter me tornado capaz em desenvolver o mestrado em tempo.

À minha família que foi minha base emocional e psicológica, sempre me apoiando em momentos de alegria e tristeza, necessidade e abundância e em épocas de lutas e paz, amo cada um de vocês;

Ao orientador Prof. Dr. Jorge Gabriel Gomes de Souza Ramos pelos ensinamentos e discussões desde a metade do meu bacharelado. Sempre me atendendo quer seja na sua sala ou no messenger/whatsapp.

À todos os Professores do Departamento de Física (DF) que contribuíram diretamente, ou indiretamente, na minha formação;

Aos colegas: Alberto, Débora, Letícia, Samuel, Moallison e Alexsander. Vivemos momentos divertidos durante esse tempo juntos, espero que o futuro nos proporcione mais destes momentos. Relacionado a minha pesquisa, agradeço ao Adson por me ajudar em um momento conturbado na implementação do algoritmo e a Ivana por ter me oferecido um espaço em sua sala.

Ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq) pelo apoio financeiro;

À Universidade Federal da Paraíba (UFPB) por ser praticamente minha segunda casa e, em especial, à todos que trabalham no Departamento de Física (DF), quer seja na limpeza, segurança e etc.

“Vanitas vanitatum et omnia Vanitas”

Ecclesiastes

Resumo

Nesta dissertação, investigamos as propriedades universais do transporte eletrônico em sistemas mesoscópicos usando pontos quânticos do tipo caótico, onde a geometria destes semicondutores muda em cada realização, isto é, simulamos diferentes configurações (tamanhos) do ponto quântico. Usaremos a teoria quântica de campos de não-equilíbrio (formalismo de Keldysh) para descrever o transporte eletrônico em pontos quânticos e investigar os desdobramentos teóricos da aplicação desta teoria no caso caótico. Seguindo as propostas de Beenakker e realizando simulações numéricas, analisamos a condutância e o ruído de disparo nestes dispositivos, comparando os resultados obtidos com a literatura, a conexão entre o ruído e o emaranhamento quântico e, por fim, a violação da desigualdade de Bell. No caso da violação da desigualdade de Bell, mostraremos resultados inéditos que relacionam o caos no ponto quântico com a formação de emaranhamento quântico.

Palavras-chaves: Formalismo de Keldysh; Pontos Quânticos Caóticos; Ruído; Emaranhamento; Desigualdade de Bell.

Abstract

In this dissertation, we investigate universal properties of the electronic transportation in mesoscopic system using chaotic quantum dots, which the geometry of such semiconductors change constantly. We use nonequilibrium quantum field theory (Keldysh formalism) to describe the electronic transport through the quantum dots and to investigate the theoretic consequences in a chaotic case. Following Beenaker's proposal and performing numerical simulations, we analyze the electronic conductance and shot noise in such devices, comparing with the literature, and the connection between shot noise and quantum entanglement. We also investigate the Bell's inequality, we show new results which establish a link between the chaos in a chaotic quantum dot and the creation of quantum entanglement.

Key-words: Keldysh Formalism; Chaotic Quantum Dots; Shot Noise; Entanglement; Bell's inequality.

Lista de ilustrações

Figura 1 – Gráfico da aplicação da interação em relação ao tempo	23
Figura 2 – Ilustração do regime mesoscópico. Figura adaptada de (NAKATSUJI, 2013).	26
Figura 3 – Visualização do Gás Bidimensional de elétrons e as portas para a construção do Ponto Quântico. Os contatos ôhmicos conectam o dispositivo com fios condutores de elétrons. Figura retirada de (HANSON et al., 2007)	26
Figura 4 – Visualização do Ponto Quântico por microscopia eletrônica. Figura retirada de (HANSON et al., 2007)	27
Figura 5 – Experimento Físico proposto por Bohm para estudo do emaranhamento quântico. Figura retirada de (CAVALCANTI et al., 2009).	27
Figura 6 – A primeira seta representa uma partícula; a segunda, um buraco. x e x' representam os pontos $(\mathbf{x}, t)$ e $(\mathbf{x}', t')$, respectivamente. Figura retirada de (FETTER; WALECKA, 2003).	35
Figura 7 – Diagramas de Feynman, estas são as contribuições de primeira ordem de $iG_{\alpha\beta}$ (6 contribuições). Figura retirada de (FETTER; WALECKA, 2003).	37
Figura 8 – Estrutura geral da função de Green $G_{\alpha\beta}$. Figura retirada (FETTER; WALECKA, 2003).	38
Figura 9 – Diagramas de segunda ordem; o caso (a) representa uma inserção da auto-energia imprópria, enquanto que o caso (b) representa uma inserção da auto-energia própria. Figura retirada (FETTER; WALECKA, 2003).	39
Figura 10 – Contorno γ no plano complexo, onde o ponto z_1 e z_2 estão sobre γ_- e γ_+ , respectivamente. Figura retirada (STEFANUCCI; LEEUWEN, 2013).	41
Figura 11 – Contorno de Keldysh-Schwinger. Figura retirada (STEFANUCCI; LEEUWEN, 2013).	42
Figura 12 – Contorno do tipo $\gamma \oplus \gamma^M$, onde o contorno de Matsubara γ^M começa em $z_a = t_{0-}$ e termina em $z_b = t_{0+} - i\hbar\beta$. Figura retirada (STEFANUCCI; LEEUWEN, 2013).	43
Figura 13 – Contorno temporal adaptado a hipótese de Mudança Adiabática. Figura retirada (STEFANUCCI; LEEUWEN, 2013).	44
Figura 14 – Deformação do contorno. Imagem retirada de (HAUG; JAUHO, 2008).	46

Figura 15 – Micrografia eletrônica de um ponto quântico, a região escura é a interface de uma estrutura heterogênea formada por GaAs/AlGaAs, onde é formado um gás de elétrons bi-dimensional. Potenciais eletrostáticos são aplicados nas portas metálicas, representada pela região clara. Podemos mudar a forma do ponto quântico aplicando diferentes voltagens, representada por V_g . Os elétrons passam pelos pontos de contato e assim são ricocheteados nas paredes do ponto quântico. Figura retirada (FOLK et al., 1996).	49
Figura 16 – Representação de um acoplamento entre o ponto quântico e um terminal. Figura retirada de (RAMOS, 2010).	50
Figura 17 – (a) Representação de um ponto de contato (SANTOS et al., 2015). (b) Ponto de contato obtido por micrografia (OBERHOLZER et al., 2002)	51
Figura 18 – Ponto quântico acoplado a dois eletrodos (terminais). (RYNDYK et al., 2016)	54
Figura 19 – Potência do ruído de disparo $S_{LL}(\omega \rightarrow 0)$ mostrado experimentalmente em um ponto quântico em uma temperatura de $T = 1.5K$. Dependendo da energia, o ruído é constante. Para energias suficientemente altas ($\Delta V \geq 131mV$), podemos ver que o ruído cresce a medida que a frequência diminui. O ruído de disparo as vezes é chamado de ruído de Poisson devido a sua distribuição. Figura retirada de (NAUEN et al., 2004).	67
Figura 20 – Média (a) e Variância (b) da Condutância em relação ao número de canais tomando como parâmetro a simetria β .	77
Figura 21 – Histogramas da Condutância no Ensemble Ortogonal para os casos $N = 1$, $N = 5$ e $N = 10$.	78
Figura 22 – Histogramas da Condutância no Ensemble Unitário para os casos $N = 1$, $N = 5$ e $N = 10$.	79
Figura 23 – Histogramas da Condutância no Ensemble Simplético para os casos $N = 1$, $N = 5$ e $N = 10$.	80
Figura 24 – Média (a) e Variância (b) do Ruído de Disparo em relação ao número de canais tomando como parâmetro a simetria β .	81
Figura 25 – Histogramas da Concorrência nos Ensembles Ortogonal, Unitário e Simplético.	82
Figura 26 – Histogramas do Emaranhamento de Formação nos Ensembles Ortogonal (a), Unitário (b) e Simplético (c), respectivamente.	84
Figura 27 – Histogramas do Parâmetro de Bell $\mathcal{S}_{CHSH}$ sem (a) e com (b) defasagem no Ensemble Ortogonal.	85
Figura 28 – Histogramas do Parâmetro de Bell $\mathcal{S}_{CHSH}$ sem (a) e com (b) defasagem no Ensemble Unitário.	86

Figura 29 – Histogramas do Parâmetro de Bell $\mathcal{S}_{CHSH}$ sem (a) e com (b) defasagem no Ensemble Simplético.	86
--	----

Lista de tabelas

Sumário

	Lista de ilustrações	11
	Lista de tabelas	14
1	INTRODUÇÃO	17
1.1	Formulação de Equilíbrio	17
1.1.1	Formulação de Schrödinger	17
1.1.2	Formulação de Heisenberg	18
1.1.3	Formulação de Interação	19
1.1.4	Operador de Evolução e Ordenamento Temporal	20
1.1.5	Mudança Adiabática	22
1.2	Física Mesoscópica	25
1.3	Emaranhamento Quântico	27
1.4	Organização Da Dissertação	28
2	FUNÇÃO DE GREEN	30
2.1	Função de Green	30
2.1.1	Definição da Função de Green	30
2.1.2	Relação com observáveis	31
2.1.3	Exemplo - Gás de Elétrons	31
2.1.4	Interpretação Física da Função de Green em Segunda Quantização	34
2.1.5	Teorema de Wick e os Diagramas de Feynman	35
3	FORMALISMO DE KELDysh	40
3.1	Introdução	40
3.2	Ideia do Contorno	40
3.3	Técnica de Continuação Analítica	44
3.4	Equação de Keldysh	48
4	PONTOS QUÂNTICOS CAÓTICOS	49
4.1	Descrição do ponto quântico caótico	49
4.2	Teoria de Matrizes Aleatórias	56
5	IMPLEMENTAÇÃO DO FORMALISMO DE KELDysh EM PROBLEMAS DE ESPALHAMENTO ELETRÔNICO EM PONTOS QUÂNTICOS	58
5.1	Descrição do Transporte de Não-Equilíbrio em Pontos Quânticos	58

5.2	Fórmula de Meir-Wingreen	60
5.3	Condutância e Ruído em um Ponto Quântico Caótico	64
6	EMARANHAMENTO QUÂNTICO	68
6.1	Paradoxo EPR e Desigualdade de Bell	68
6.2	Emaranhamento Quântico em Pontos Quânticos Caóticos	70
7	SIMULAÇÃO E RESULTADOS	76
7.1	Condutância	76
7.2	Potência do Ruído de Disparo	81
7.3	Concorrência	82
7.4	Emaranhamento	83
7.5	Parâmetro de Bell-CHSH S_{CHSH}	85
8	CONCLUSÃO E PERSPECTIVAS	87
8.1	Conclusões	87
8.2	Perspectivas	87
Conclusões		89
REFERÊNCIAS		89
APÊNDICES		93
APÊNDICE A – DEDUÇÃO DA MATRIZ DE ESPALHAMENTO		94
APÊNDICE B – EQUAÇÃO DE KELDYSH		95
APÊNDICE C – TÉCNICA DE EQUAÇÃO DE MOVIMENTO.		97
APÊNDICE D – DESIGUALDADE DE BELL		99
APÊNDICE E – VIOLAÇÃO DA DESIGUALDADE DE BELL NA MECÂNICA QUÂNTICA		101
APÊNDICE F – RELAÇÃO DO CORRELATOR E O RUÍDO		103

1 Introdução

Atualmente a indústria de eletrônicos busca alternativas para diminuir o tamanho de semicondutores com o objetivo de tornar o processamento de computadores mais rápido e eficiente. Tais dimensões chegaram a desafiadora escala de nanômetros, onde pode haver disputas de fenômenos quânticos e caóticos. Nesta escala, o ponto quântico, também conhecido como átomo artificial, é um dos dispositivos fabricados em sistemas mesoscópicos. Estudaremos pontos quânticos do tipo caótico, onde a geometria destes semicondutores muda em cada realização, onde entendemos por realização diferentes configurações (tamanhos) do ponto quântico. Assim, o formalismo que abordaremos é o formalismo de Keldysh, ou também conhecido como formalismo de Função de Green de não-equilíbrio, e analisaremos a aplicação desse formalismo em pontos quânticos caóticos.

O objetivo deste capítulo é abordar de forma breve os tópicos que serão apresentados na dissertação. Inicialmente apresentaremos os formalismos de equilíbrio como ponto de partida da dissertação. Após isso, apresentaremos as principais motivações do formalismo de Keldysh, sua diferença em relação a uma teoria de equilíbrio e possíveis aplicações; depois estudaremos sua aplicação em sistemas mesoscópicos com ênfase em pontos quânticos caóticos e, por fim, falaremos sobre algumas propriedades importantes em sistemas mesoscópicos como condutância, ruído, concorrência e emaranhamento.

Dada a importância histórica e por fatos pedagógicos, começaremos introduzindo a formulação de equilíbrio.

1.1 Formulação de Equilíbrio

1.1.1 Formulação de Schrödinger

A formulação de Schrödinger, Heisenberg e Interação (Dirac) se preocupam em aspectos gerais da mecânica quântica como a evolução dos estados, observáveis, e a estatística das medições. É necessário também enfatizar que cada formulação possui suas vantagens.

A formulação de Schrödinger diz que os estados dependem do tempo e os operadores são constantes. A dinâmica dos estados em relação ao tempo é descrita pela equação de Schrödinger:

$$i\hbar \frac{\partial |\psi(t)\rangle}{\partial t} = \hat{H} |\psi(t)\rangle, \quad (1.1)$$

onde um observável qualquer $\hat{O}$ não depende do tempo, isto é, $\hat{O}(t) \equiv \hat{O}$.

De acordo com essa equação, a evolução de um estado é dado por:

$$|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t) |\psi(0)\rangle. \quad (1.2)$$

Se o hamiltoniano for independente do tempo, o operador de evolução temporal $\hat{U}(t)$ será dado por:

$$\hat{U}(t) = e^{-i\frac{\hat{H}}{\hbar}t}. \quad (1.3)$$

Esse operador representa a evolução de um estado $|\psi\rangle$ do tempo $t = 0$ a um tempo t .

A grande vantagem da formulação de Schrödinger é poder trabalhar com funções pois elas exploram a descrição contínua do sistema.

1.1.2 Formulação de Heisenberg

Diferente da formulação de Schrödinger, a característica principal da formulação de Heisenberg é que os estados são constantes, enquanto que os operadores evoluem no tempo. Vamos calcular a média de um observável $\hat{O}$ baseado no formalismo de Schrödinger, e obteremos a correspondência na formulação de Heisenberg:

$$\langle \hat{O}(t) \rangle = \langle \psi_S(t) | \hat{O}_S | \psi_S(t) \rangle = \langle \psi_H(0) | \hat{U}^\dagger(t) \hat{O}_S \hat{U}(t) | \psi_H(0) \rangle = \langle \psi_H(0) | \hat{O}_H(t) | \psi_H(0) \rangle, \quad (1.4)$$

onde $|\psi_S\rangle$ representa o estado dependente do tempo na formulação de Schrödinger, enquanto que $|\psi_H(0)\rangle$ representa o estado independente do tempo na formulação de Heisenberg. Em relação aos observáveis, $\hat{O}_S$ é o operador independente do tempo na formulação de Schrödinger, enquanto que $\hat{O}_H(t)$ é o operador dependente do tempo na formulação de Heisenberg.

Assim, a dinâmica dos operadores é dada pela forma funcional de Heisenberg

$$\hat{O}_H(t) = \hat{U}^\dagger(t, 0) \hat{O}_S(0) \hat{U}(t, 0). \quad (1.5)$$

Derivando $\hat{O}_H(t)$ em relação ao tempo, temos

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d\hat{O}_H(t)}{dt} &= i\hbar \frac{\partial \hat{U}^\dagger(t)}{\partial t} \hat{O}_S(t) \hat{U}(t) + i\hbar \hat{U}^\dagger(t) \frac{\partial \hat{O}_S(t)}{\partial t} \hat{U}(t) + i\hbar \hat{U}^\dagger(t) \hat{O}_S(t) \frac{\partial \hat{U}(t)}{\partial t}, \\ &= -\hat{U}^\dagger(t) \hat{H}_S(t) \hat{O}_S(t) \hat{U}(t) + \hat{U}^\dagger(t) \hat{O}_S(t) \hat{H}_S(t) \hat{U}(t) + i\hbar \hat{U}^\dagger(t) \frac{\partial \hat{O}_S(t)}{\partial t} \hat{U}(t), \\ &= -\hat{U}^\dagger(t) \hat{H}_S(t) \hat{U}(t) \hat{U}^\dagger(t) \hat{O}_S(t) \hat{U}(t) + \hat{U}^\dagger(t) \hat{O}_S(t) \hat{U}(t) \hat{U}^\dagger(t) \hat{H}_S(t) \hat{U}(t) \\ &\quad + i\hbar \hat{U}^\dagger(t) \frac{\partial \hat{O}_S(t)}{\partial t} \hat{U}(t), \\ &= -\hat{H}_H(t) \hat{O}_H(t) + \hat{O}_H(t) \hat{H}_H(t) + i\hbar \left(\frac{\partial \hat{O}_S(t)}{\partial t} \right)_H \end{aligned} \quad (1.6)$$

e obtemos a equação:

$$\frac{d\hat{O}_H}{dt} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}_H(t), \hat{O}_H(t)] + \left(\frac{\partial \hat{O}_S(t)}{\partial t} \right)_H, \quad (1.7)$$

que é conhecida como equação de Heisenberg.

Heisenberg formulou a mecânica quântica a partir dos operadores com o objetivo de obter uma conexão com a mecânica clássica usando o princípio da correspondência. Matematicamente falando, devemos nos preocupar em resolver problemas na forma matricial, nos limitando a estudar sistemas discretos.

1.1.3 Formulação de Interação

Já a formulação de interação, ou também conhecida como formulação de Dirac, consiste em considerar um hamiltoniano do tipo

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}(t), \quad (1.8)$$

onde $\hat{H}_0$ é bem conhecido no sentido de que temos conhecimentos sobre seus auto-estados, $\hat{V}$ é possivelmente dependente do tempo e o estado na formulação de Schrödinger $|\psi_S(t)\rangle$ satisfaz a equação

$$i\hbar \frac{\partial |\psi_S(t)\rangle}{\partial t} = \hat{H} |\psi_S(t)\rangle. \quad (1.9)$$

Vamos agora definir o estado de interação $|\psi_I(t)\rangle$

$$|\psi_I(t)\rangle \equiv e^{i\frac{\hat{H}_0}{\hbar}t} |\psi_S(t)\rangle, \quad (1.10)$$

que é meramente uma transformação unitária do estado $|\psi_S(t)\rangle$. O objetivo de definirmos este estado é que encontraremos uma equação análoga à equação de Schrödinger para os estados de interação $|\psi_I(t)\rangle$, regido pelo hamiltoniano de interação $H_I(t)$; por outro lado, o operador $\hat{H}_I$ evoluirá analogamente ao formalismo de Heisenberg. Assim, derivando o estado de interação em relação ao tempo e multiplicando por $i\hbar$, obtemos

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial |\psi_I(t)\rangle}{\partial t} &= -\hat{H}_0 e^{i\frac{\hat{H}_0}{\hbar}t} |\psi_S(t)\rangle + e^{i\frac{\hat{H}_0}{\hbar}t} i\hbar \frac{\partial |\psi_S(t)\rangle}{\partial t}, \\ &= -\hat{H}_0 e^{i\frac{\hat{H}_0}{\hbar}t} |\psi_S(t)\rangle + e^{i\frac{\hat{H}_0}{\hbar}t} (\hat{H}_0 + \hat{V}) |\psi_S(t)\rangle, \\ &= e^{i\frac{\hat{H}_0}{\hbar}t} (-\hat{H}_0 + \hat{H}_0 + \hat{V}) |\psi_S(t)\rangle = e^{i\frac{\hat{H}_0}{\hbar}t} \hat{V}(t) e^{-i\frac{\hat{H}_0}{\hbar}t} |\psi_I(t)\rangle. \end{aligned} \quad (1.11)$$

Continuando, temos

$$i\hbar \frac{\partial |\psi_I(t)\rangle}{\partial t} = \hat{H}_I(t) |\psi_I(t)\rangle, \quad \hat{H}_I(t) \equiv e^{i\frac{\hat{H}_0}{\hbar}t} \hat{V}(t) e^{-i\frac{\hat{H}_0}{\hbar}t}. \quad (1.12)$$

Note que encontramos um análogo à equação de Schrödinger para os estados de interação $|\psi_I(t)\rangle$, com o hamiltoniano de interação $\hat{H}_I(t)$; enquanto que o operador $\hat{H}_I$ evolui

analogamente ao formalismo de Heisenberg. Olhando a equação análoga a de Schrödinger, percebemos que isto sugere a existência de um operador de evolução temporal no formalismo de interação dado por

$$|\psi_I(t)\rangle = \hat{U}_I(t) |\psi_I(0)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar} \int_0^t \hat{H}_I(t') dt'} |\psi_I(0)\rangle, \quad (1.13)$$

isto é, a evolução é regida agora pelo hamiltoniano de interação. Essa evolução é obtida para o caso em que o hamiltoniano depende do tempo, mas os hamiltonianos em tempos distintos comutam.

Em geral, $\hat{H}_0$, que eventualmente é diagonal, não comuta com $\hat{H}_I$, que em geral não é diagonal pois representa a capacidade do sistema transitar entre os auto-estados do hamiltoniano $\hat{H}_0$. Um observável $\hat{O}$ arbitrário satisfaz

$$\langle \psi'_S(t) | \hat{O}_S | \psi_S(t) \rangle = \langle \psi'_I(t) | e^{i\frac{\hat{H}_0}{\hbar}t} \hat{O}_S e^{-i\frac{\hat{H}_0}{\hbar}t} | \psi_S(t) \rangle = \langle \psi'_I(t) | \hat{O}_I | \psi_I(t) \rangle, \quad (1.14)$$

onde,

$$\hat{O}_I = e^{i\frac{\hat{H}_0}{\hbar}t} \hat{O}_S e^{-i\frac{\hat{H}_0}{\hbar}t}. \quad (1.15)$$

Note que a Equação (1.14) expressa que a média de um determinado observável independe da representação na qual estamos investigando. Note também que $\hat{O}_S$ é um operador independente do tempo, enquanto que o operador $\hat{O}_I$ possui uma dependência temporal explícita. A equação de movimento para o operador $\hat{O}_I$ é dada por:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial \hat{O}_I(t)}{\partial t} &= i\hbar \left(\frac{i}{\hbar} \right) \hat{H}_0 e^{i\frac{\hat{H}_0}{\hbar}t} \hat{O}_S e^{-i\frac{\hat{H}_0}{\hbar}t} + e^{i\frac{\hat{H}_0}{\hbar}t} i\hbar \frac{\partial (\hat{O}_S e^{-i\frac{\hat{H}_0}{\hbar}t})}{\partial t}, \\ &= -\hat{H}_0 e^{i\frac{\hat{H}_0}{\hbar}t} \hat{O}_S e^{-i\frac{\hat{H}_0}{\hbar}t} + e^{i\frac{\hat{H}_0}{\hbar}t} i\hbar \left[\frac{\partial \hat{O}_S}{\partial t} e^{-i\frac{\hat{H}_0}{\hbar}t} - \hat{O}_S \frac{i}{\hbar} \hat{H}_0 e^{-i\frac{\hat{H}_0}{\hbar}t} \right], \\ &= \hat{O}_I(t) \hat{H}_0 - \hat{H}_0 \hat{O}_I(t) = [\hat{O}_I(t), \hat{H}_0]. \end{aligned} \quad (1.16)$$

Temos, portanto,

$$i\hbar \frac{\partial \hat{O}_I(t)}{\partial t} = [\hat{O}_I(t), \hat{H}_0], \quad (1.17)$$

onde foi usado na dedução que $\frac{\partial \hat{O}_S}{\partial t} = 0$. Podemos ver que o operador na formulação de interação satisfaz uma equação de movimento que depende do hamiltoniano H_0 .

1.1.4 Operador de Evolução e Ordenamento Temporal

É interessante também estudar como fica o operador de evolução temporal na representação de interação. Primeiramente, se o hamiltoniano é independente do tempo, o operador de evolução temporal é dado da seguinte forma:

$$\hat{U}(t, t_0) = e^{i\frac{\hat{H}}{\hbar}(t-t_0)}. \quad (1.18)$$

Queremos analisar alguns aspectos gerais do operador de evolução temporal e como ele pode ser escrito para um hamiltoniano dependente do tempo. Inicialmente, vamos verificar algumas propriedades do operador de evolução temporal, são elas:

1. Primeira propriedade: No tempo $t = t_0$ não há evolução e, portanto, temos que

$$\hat{U}(t_0, t_0) = \mathbb{1}. \quad (1.19)$$

2. Segunda propriedade: Como o operador de evolução é uma exponencial de um hamiltoniano, temos o fato matemático de que a exponencial de um operador hermitiano é um operador unitário. Portanto,

$$\hat{U}^\dagger(t, t_0)\hat{U}(t, t_0) = \hat{U}(t, t_0)\hat{U}^\dagger(t, t_0) = \mathbb{1} \quad \rightarrow \quad \hat{U}^\dagger(t, t_0) = \hat{U}^{-1}(t, t_0). \quad (1.20)$$

3. Terceira propriedade: Os sistemas físicos sobre os quais vamos investigar respeitam a homogeneidade temporal. Isso significa que fazendo uma evolução de t_1 até t_2 , e depois fazendo uma evolução de t_2 até t_3 , obviamente com o mesmo hamiltoniano, esperamos que essas duas evoluções concatenadas forneçam uma evolução de t_1 até t_3 . Portanto,

$$\hat{U}(t_1, t_2)\hat{U}(t_2, t_3) = \hat{U}(t_1, t_3). \quad (1.21)$$

4. Quarta propriedade: Se evoluirmos o estado de t_0 até um t , e depois voltarmos de t para t_0 , esperamos que o estado permaneça inalterado.

$$\hat{U}(t, t_0)\hat{U}(t_0, t) = \mathbb{1} \rightarrow \hat{U}(t_0, t) = \hat{U}^\dagger(t, t_0). \quad (1.22)$$

Essas propriedades nos ajudam a deduzir um análogo da equação de Schrödinger para a formulação de interação. Pela eq.(1.12) podemos inferir que o estado na formulação de interação evolui da mesma forma que na formulação de Schrödinger:

$$|\psi_I(t)\rangle = \hat{U}(t, t_0) |\psi_I(t_0)\rangle. \quad (1.23)$$

Explorando a eq.(1.12) e a eq.(1.23), temos que:

$$i\hbar \frac{\partial \hat{U}(t, t_0)}{\partial t} = \hat{H}_I(t)\hat{U}(t, t_0), \quad (1.24)$$

integrando ambos os lados

$$\hat{U}(t, t_0) - \hat{U}(t_0, t_0) = -\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' \hat{H}_I(t') \hat{U}(t', t_0), \quad (1.25)$$

e, usando a primeira propriedade dos operadores de evolução, temos:

$$\hat{U}(t, t_0) = \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' \hat{H}_I(t') \hat{U}(t', t_0). \quad (1.26)$$

Essa equação é análoga a equação integral de Volterra, e é resolvida por método iterativo, dado que o operador $\hat{U}$ está presente tanto do lado direito como no esquerdo. Assim, obtendo ordens superiores, temos

$$\begin{aligned}\hat{U}(t, t_0) &= \mathbb{1} + \frac{-i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt_1 \hat{H}_I(t_1) \\ &+ \left(\frac{-i}{\hbar}\right)^2 \int_{t_0}^t dt_2 \int_{t_0}^{t_2} dt_1 \hat{H}_I(t_2) \hat{H}_I(t_1) \\ &+ \left(\frac{-i}{\hbar}\right)^3 \int_{t_0}^t dt_3 \int_{t_0}^{t_3} dt_2 \int_{t_0}^{t_2} dt_1 \hat{H}_I(t_3) \hat{H}_I(t_2) \hat{H}_I(t_1) + \dots\end{aligned}\quad (1.27)$$

Observe que os operadores hamiltonianos no integrando estão ordenados da seguinte forma: Operadores com tempos maiores estão mais à esquerda daqueles com tempos menores. Para manter esse ordenamento, é necessário introduzir o que chamamos de operador de ordenamento temporal pois como o hamiltoniano depende do tempo, em geral, eles não comutam. A ideia do operador temporal é introduzida da seguinte forma: Considere um produto de operadores em tempos distintos, que em princípio mantém tempos sem ordem cronológica

$$\hat{O}_n(t_n) \hat{O}_{n-1}(t_{n-1}) \dots \hat{O}_2(t_2) \hat{O}_1(t_1). \quad (1.28)$$

Portanto, os números $0, 1, \dots, n$ aqui fornecem a ordem dos operadores.

O operador de ordenamento temporal $\mathcal{T}$ age da seguinte forma:

$$\mathcal{T}\left(\hat{O}_n(t_n) \dots \hat{O}_1(t_1)\right) \equiv \hat{O}_{i_n}(t_{i_n}) \dots \hat{O}_{i_1}(t_{i_1}), \quad (1.29)$$

onde $t_{i_n} > t_{i_{n-1}} > \dots > t_{i_1}$ e o conjunto $(i_1, i_2, \dots, i_n)$ é uma permutação de $(1, 2, \dots, n)$. Em (KLEINERT, 2009) é obtido a forma geral do operador de evolução temporal para o caso em que o hamiltoniano possui uma perturbação dependente do tempo

$$\hat{U}(t, t_0) = \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{-i}{\hbar}\right)^n \frac{1}{n!} \int_{t_0}^t dt_n \dots \int_{t_0}^t dt_1 \mathcal{T}\left[\hat{H}_I(t_n) \dots \hat{H}_I(t_1)\right] = \mathcal{T}\left\{e^{\frac{-i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt_i \hat{H}_I(t_i)}\right\}. \quad (1.30)$$

Deduzido o operador de evolução temporal $\hat{U}(t, t_0)$ descrito de forma perturbativa, podemos estudar hamiltonianos que possuem uma dependência temporal particular, como é o caso da Mudança Adiabática.

1.1.5 Mudança Adiabática

A partir daqui introduzimos a formulação de Equilíbrio. Abordamos o caso do hamiltoniano $\hat{H}$ descrito como uma parte não perturbativa $\hat{H}_0$ e uma parte perturbativa que depende do tempo $\hat{H}_I$. Também estudamos o operador de evolução temporal e sua forma funcional para sistemas nos quais o hamiltoniano é dependente do tempo. Agora

vamos olhar uma forma particular de ligar e desligar uma interação chamado de Mudança Adiabática. A Mudança Adiabática consiste em preparar um sistema inicialmente regido pelo hamiltoniano não-interagente $\hat{H}_0$ e evoluir esse sistema ligando sua interação até chegar em um tempo ($t = 0$) no qual o sistema passa a ser regido tanto pela parte de não-interação quanto pela de interação $\hat{H}_0 + \hat{H}_I$. É possível mostrar a relação entre os estados no regime interagente e no regime não interagente. Veremos que ligando e desligando a interação ao longo do tempo, o estado inicial do sistema não muda, caracterizando uma formulação que chamaremos de formulação de equilíbrio.

Matematicamente, a mudança adiabática é representada pelo hamiltoniano a seguir:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + e^{-\epsilon|t|} \hat{H}_I, \quad (1.31)$$

onde ϵ é uma quantidade positiva de valor baixo. O comportamento do hamiltoniano em relação ao tempo pode ser visto de acordo com a Figura 1:

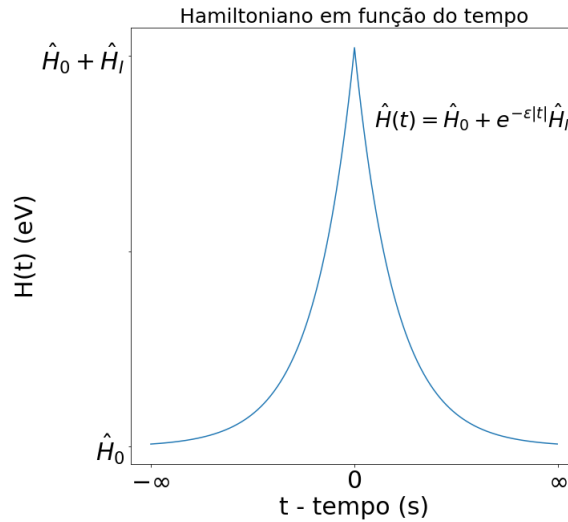


Figura 1 – Gráfico da aplicação da interação em relação ao tempo

Se $\epsilon \rightarrow 0$, então obtemos $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_I$ para todo o tempo t . Isso significa que a interação é ligada e desligada infinitamente devagar, e podemos considerar que a interação $\hat{H}_I$ atua no sistema em todo o tempo. O estado na formulação de interação evoluirá da seguinte forma

$$|\psi_I(t)\rangle = \hat{U}_\epsilon(t, t_0) |\psi_I(t_0)\rangle. \quad (1.32)$$

onde o operador $\hat{U}_\epsilon(t, t_0)$ será dado por:

$$\hat{U}_\epsilon(t, t_0) = \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{-i}{\hbar} \right)^n \frac{1}{n!} \int_{t_0}^t dt_n \dots \int_{t_0}^t dt_1 e^{-\epsilon(|t_1| + \dots + |t_n|)} \mathcal{T} \left[\hat{H}_I(t_n) \dots \hat{H}_I(t_1) \right]. \quad (1.33)$$

Se $t_0 \rightarrow -\infty$, temos que o hamiltoniano em t_0 será $\hat{H}_0$, isto é, o hamiltoniano será sem perturbação. Nesse limite, pela formulação de Schrödinger, o estado evolui da seguinte

forma

$$|\psi_S(t_0)\rangle = e^{-i\frac{E_0}{\hbar}t_0} |\phi_0\rangle, \quad (1.34)$$

onde $\hat{H}_0 |\phi_0\rangle = E_0 |\phi_0\rangle$ representa a equação de auto-valores do hamiltoniano sem perturbação.

De acordo com a formulação de interação, a evolução do estado antes da interação é dada por

$$|\psi_I(t_0)\rangle = e^{i\frac{\hat{H}_0}{\hbar}t_0} |\psi_S(t_0)\rangle = |\phi_0\rangle \quad (1.35)$$

Desta forma, em um passado remoto, temos que o estado na formulação de interação não evolui. Há uma relação importante entre a formulação de Heisenberg e a de interação. Essa relação é dada da seguinte forma

$$|\psi_H\rangle = |\psi_I(0)\rangle = \hat{U}(0, t_0) |\psi_I(t_0)\rangle. \quad (1.36)$$

Assim, obtemos

$$|\psi_H\rangle = |\psi_I(0)\rangle = \hat{U}_\epsilon(0, -\infty) |\phi_0\rangle. \quad (1.37)$$

Para o caso em que $\epsilon \rightarrow 0$, há uma relação entre o estado $|\phi_0\rangle$ e o estado $|\psi_0\rangle$ estabelecida pelo teorema de (GELL-MANN; LOW, 1951).

Teorema 1 (Gell-Man e Low) *Se a quantidade*

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{\hat{U}_\epsilon(0, -\infty) |\phi_0\rangle}{\langle \phi_0 | \hat{U}_\epsilon(0, -\infty) | \phi_0 \rangle} \equiv \frac{|\psi_0\rangle}{\langle \phi_0 | \psi_0 \rangle} \quad (1.38)$$

existir em todas as ordens de perturbação, então o lado direito é um auto-estado de $\hat{H}$, isto é,

$$\hat{H} \frac{|\psi_0\rangle}{\langle \phi_0 | \psi_0 \rangle} = E \frac{|\psi_0\rangle}{\langle \phi_0 | \psi_0 \rangle}, \quad (1.39)$$

Dessa forma, dado um auto-estado do hamiltoniano não-interagente $|\phi_0\rangle$, o sistema evolui para o estado $|\psi_0\rangle$ quando a perturbação é aplicada adiabaticamente. Se $|\phi_0\rangle$ for o estado fundamental do sistema não-interagente, $|\psi_0\rangle$ usualmente é o estado fundamental do sistema interagente, entretanto, não é uma condição necessária.

Essa prova também é válida para a existência do estado

$$\frac{\hat{U}_\epsilon(0, +\infty) |\phi_0\rangle}{\langle \phi_0 | \hat{U}_\epsilon(0, +\infty) | \phi_0 \rangle}. \quad (1.40)$$

Nesse caso, o sistema volta de $t = +\infty$, onde o auto-estado é $|\phi_0\rangle$, até $t = 0$. Se em $t = 0$ o auto-estado em $\hat{H}$ não for degenerado, então

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{\hat{U}_\epsilon(0, +\infty) |\phi_0\rangle}{\langle \phi_0 | \hat{U}_\epsilon(0, +\infty) | \phi_0 \rangle} = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{\hat{U}_\epsilon(0, -\infty) |\phi_0\rangle}{\langle \phi_0 | \hat{U}_\epsilon(0, -\infty) | \phi_0 \rangle}. \quad (1.41)$$

Assim, podemos obter $|\phi_0\rangle$ em $t = \pm\infty$ da seguinte forma:

$$|\phi_0(\pm\infty)\rangle = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \hat{U}_\epsilon(\pm\infty, 0) |\psi_0\rangle. \quad (1.42)$$

Como $|\psi_0\rangle$ é não degenerado, temos que os estados diferem somente por um fator:

$$|\phi_0(+\infty)\rangle = e^{iL} |\phi_0(-\infty)\rangle. \quad (1.43)$$

Dessa forma, temos que a matriz de espalhamento é dada por:

$$e^{iL} = \langle\phi_0|\mathcal{S}(\infty, -\infty)|\phi_0\rangle. \quad (1.44)$$

Embora estejamos falando em perturbação (adiabática), é necessário entender que mesmo após a perturbação, o estado inicial é igual ao final, a menos de uma fase. Isso caracteriza uma condição de equilíbrio. No caso em que não há equilíbrio, isto é, para um hamiltoniano dependente do tempo de forma geral, esperamos que o estado final seja diferente do estado inicial. O Formalismo de Keldysh trata problemas nos quais não conhecemos o estado interagente $|\psi_0\rangle$ pois a existência desse estado é assegurado devido a forma particular do hamiltoniano na Mudança Adiabática. Dependendo do sistema, é difícil conhecer o estado $|\psi_0\rangle$. Portanto, o formalismo de Keldysh recebeu muita atenção nos anos recentes com a física mesoscópica.

1.2 Física Mesoscópica

A Física Mesoscópica é uma área da Física da Matéria Condensada que investiga regimes entre o micro e o macroscópico. Quando falamos em regime microscópico, falamos em estruturas com dimensão menor ou igual a nanômetros, enquanto que o regime macroscópico está situado em micrômetros até objetos do nosso cotidiano. Na Figura 2 podemos encontrar as escalas do regime quântico, mesoscópico e clássico.

Em um sistema clássico, a matéria possui um comportamento corpuscular regido pelas leis da mecânica clássica. Já em um sistema quântico, a matéria possui um comportamento dual, isto é, dependendo do aparato de medição, é possível que elétrons se comportem tanto como partículas ou como ondas, apresentando fenômenos como difração e interferência no último caso. O objetivo da física mesoscópica é relacionar propriedades microscópicas com macroscópicas a partir do princípio da correspondência, onde as leis da mecânica quântica recuperam as leis da mecânica clássica.

Nosso sistema físico de interesse em física mesoscópica é o ponto quântico. Por definição, um ponto quântico é uma região pequena onde elétrons são confinados. A Figura 3 mostra a construção de um ponto quântico, onde a interface da heteroestrutura GaAs/AlGaAs forma um gás bidimensional de elétrons. Os contatos ôhmicos são as partes do dispositivo que conectam o ponto quântico a um fio que conduz elétrons. Na porta

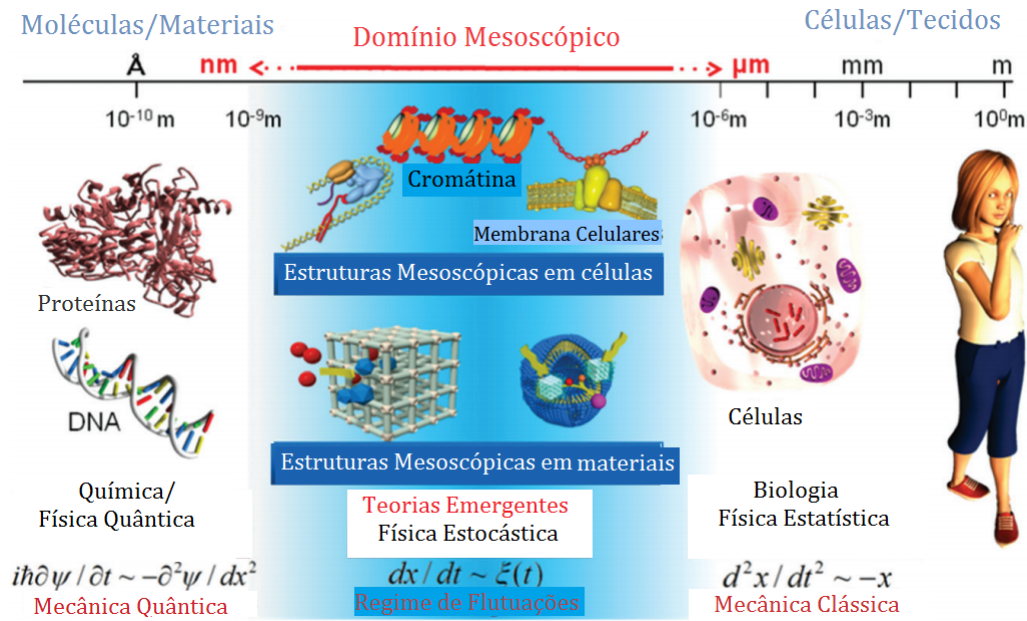


Figura 2 – Ilustração do regime mesoscópico. Figura adaptada de (NAKATSUJI, 2013).

(região escura) é aplicado uma voltagem negativa, criando regiões de depleção (região branca).

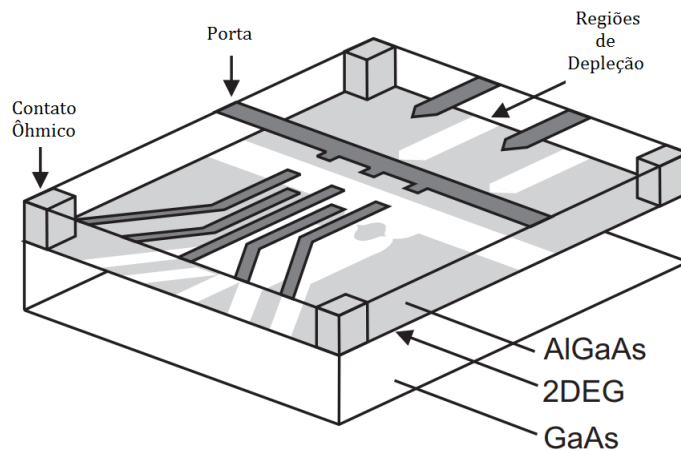


Figura 3 – Visualização do Gás Bidimensional de elétrons e as portas para a construção do Ponto Quântico. Os contatos ôhmicos conectam o dispositivo com fios condutores de elétrons. Figura retirada de (HANSON et al., 2007)

As regiões de depleção delimitam o movimento dos elétrons no gás bidimensional. Dessa forma, o confinamento de elétrons pode ser estabelecido arranjando uma configuração das portas. Na mecânica quântica, quando um sistema é confinado, há quantizações da energia, criando diversas energias acessíveis. O número dessas energias acessíveis depende das dimensões do ponto quântico. Outra configuração de um ponto quântico pode ser vista na Figura 4.

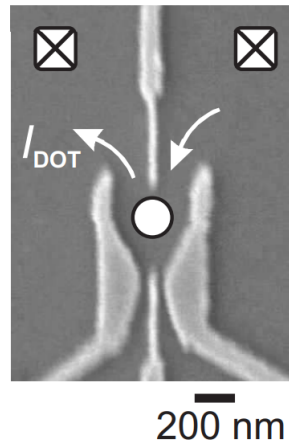


Figura 4 – Visualização do Ponto Quântico por microscopia eletrônica. Figura retirada de (HANSON et al., 2007)

1.3 Emaranhamento Quântico

Uma das principais propriedades da mecânica quântica é chamada de emaranhamento quântico. Tal propriedade surge em diversos sistemas quânticos, como sistemas de partículas elementares, fotônicos, eletrônicos e etc. No nosso caso, o emaranhamento é uma aplicação realizável em pontos quânticos. Em 1935, Einstein, Podolsky e Rosen questionaram se a descrição da realidade física pela mecânica quântica poderia ser completa em (EINSTEIN et al., 1935). Para a mecânica quântica, é possível que um sistema esteja em diversas realidades distintas ao mesmo tempo. Este fenômeno é conhecido como superposição quântica. A realidade objetiva do sistema só é acessível quando é realizada uma medição, destruindo o estado composto pela superposição de todas as realidades. A discussão sobre o paradoxo EPR foi melhor adaptado por (BOHM; AHARONOV, 1957) da seguinte forma:

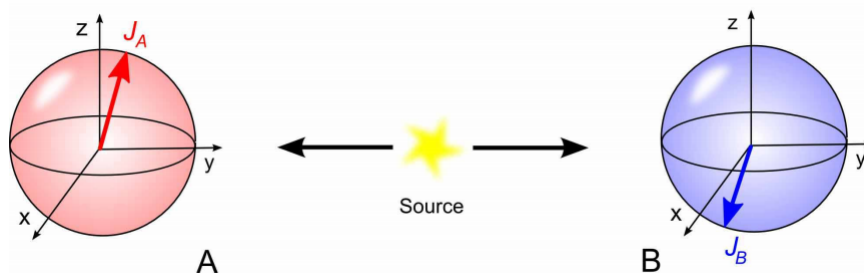


Figura 5 – Experimento Físico proposto por Bohm para estudo do emaranhamento quântico. Figura retirada de (CAVALCANTI et al., 2009).

Vamos considerar uma fonte que emite um par emaranhado de partículas, de acordo com a Figura 5, podendo ser a polarização de fótons ou spins de elétrons. Assim, falando sobre elétrons, um deles é mandado para Bob, indicado por B , e o outro para Alice, indicado por A . Tanto Alice quanto Bob podem realizar medições, indicadas por J_A e J_B

na figura, respectivamente. Desta forma, o estado quântico que descreve todo o sistema é escrito na forma:

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}[|\uparrow\rangle_A |\downarrow\rangle_B - |\downarrow\rangle_A |\uparrow\rangle_B], \quad (1.45)$$

onde $|\uparrow\rangle$ e $|\downarrow\rangle$ representam as projeções de spin em relação ao eixo z. O estado $|\Psi\rangle$ mostra que se Alice medir spin up, então Bob medirá spin down e vice-versa.

Einstein acreditava em uma natureza objetiva independente da medição. No nosso caso, isto significa que os spins up e down já estariam determinados antes mesmo de Alice e Bob realizarem as medições. Por outro lado, a interpretação de Copenhague afirmava que os spins estavam em uma superposição quântica e os elétrons não possuíam uma realidade objetiva antes da medição, o próprio ato de medição fornecia uma realidade objetiva, provocando um colapso do estado quântico $|\Psi\rangle$.

O fato de Einstein não concordar com as ideias da interpretação de Copenhague está associado a alguns conceitos da própria relatividade. Quando falamos sobre o estado $|\Psi\rangle$, não mencionamos em momento algum o espaço no qual estamos trabalhando. Assim, se Alice medir spin up, ela saberá que Bob irá medir spin down, mesmo que essas medições sejam instantâneas e suas distâncias sejam suficientemente longas ao ponto de não haver nenhuma relação causal entre os dois eventos. A medição de Alice colapsa o estado $|\Psi\rangle$ para $|\uparrow\rangle$ ($|\downarrow\rangle$) fazendo com que Bob obtenha somente o estado $|\downarrow\rangle$ ($|\uparrow\rangle$). Ironicamente, Einstein chamou este fenômeno de Ação Fantasmagórica a Distância, que pode ser encontrado em (BELL, 1987), pois a medição de Alice implica em um resultado específico para Bob. Conceitos como estes não eram conhecidos pois o fato da medição de Alice interferir no resultado da medição de Bob deveria ser intermediado por um ente físico, como o campo eletromagnético; entretanto, tais campos são limitados pela velocidade da luz c .

(BOHM, 1952) propôs uma teoria com o objetivo de obter inferências estatísticas dos experimentos da mecânica quântica a partir da hipótese de que a realidade objetiva era descrita por variáveis que não podíamos obter fisicamente, tais variáveis eram chamadas de variáveis locais escondidas ou ocultas. (BELL, 1964) mostrou que uma teoria de variáveis locais ocultas era incompatível com as previsões da mecânica quântica a partir da sua desigualdade, conhecido na literatura como desigualdade de Bell. A violação desta desigualdade implica que uma teoria que se baseia em realismo e localidade é incompatível com as previsões da mecânica quântica.

1.4 Organização Da Dissertação

A seguir, no 2º capítulo, falaremos sobre a função de Green, mostrando sua definição e sua relação com observáveis, explorando o exemplo do gás ideal e fornecendo uma interpretação física. Além disso, vamos falar sobre o Teorema de Wick e os diagramas

de Feynman com o objetivo de introduzir o conceito de auto-energia (*self-energy*) e a equação de Dyson.

No 3º capítulo abordaremos o Formalismo de Keldysh, onde comentaremos sobre a ideia do contorno no cálculo de uma média de um observável genérico. Comentaremos também sobre a técnica de continuação analítica, também conhecida como teorema ou regra de Langreth, que permite expressar os observáveis em variáveis temporais reais.

Com a parte teórica desenvolvida, no 4º capítulo falaremos sobre nosso sistema física de interesse: os pontos quânticos caóticos. Iniciamos com uma descrição do que é um ponto quântico caótico, obtemos sua formulação em termos das funções de Green e mostraremos a modelagem hamiltoniana de um ponto quântico via teoria de matrizes aleatórias.

Introduzido o conceito de um ponto quântico caótico, estudaremos a implementação do formalismo de Keldysh em problemas de espalhamento eletrônico em pontos quânticos no capítulo 5. Além disso, aplicaremos o formalismo de não-equilíbrio ao ponto quântico caótico, onde o problema de não-equilíbrio se reduz ao regime não interagente. Após isso discutiremos conceitos como condutância e ruído.

Após isso, estudaremos emaranhamento quântico no 6º capítulo e estabeleceremos uma conexão entre problemas de espalhamento em pontos quânticos caóticos e quantificadores como concorrência e emaranhamento de formação. Além disso, mostraremos a obtenção da violação da desigualdade de Bell em pontos quânticos no regime opaco, regime no qual a probabilidade de transmissão do guia para a cavidade caótica é muito baixa.

No capítulo 7 mostraremos os gráficos e histogramas obtidos nas simulações numéricas realizadas, no capítulo 8 discutiremos os resultados obtidos e no capítulo 9 será a conclusão e as perspectivas.

2 Função de Green

2.1 Função de Green

2.1.1 Definição da Função de Green

Este capítulo introduziremos o conceito de função de Green, que também é chamado de propagador. A função de Green será definida a partir da formulação de segunda quantização com o auxílio do ordenamento temporal. Como já vimos, a segunda quantização é uma representação satisfatória, incorporando os conceitos de simetria relacionados a indistinguibilidade das partículas na mecânica quântica. Além disso, o ordenamento temporal é importante na imposição de uma estrutura causal na mecânica quântica, onde tal estrutura pode ser exigida se quisermos conexões com outras áreas, como a própria termodinâmica.

Definição 2.1.1 *A função de Green para uma partícula é definida por*

$$iG_{\alpha\beta}(\mathbf{x}t, \mathbf{x}'t') = \frac{\langle \psi_0 | \mathcal{T}[\hat{\psi}_{H\alpha}(\mathbf{x}t)\hat{\psi}_{H\beta}^\dagger(\mathbf{x}'t')] | \psi_0 \rangle}{\langle \psi_0 | \psi_0 \rangle}. \quad (2.1)$$

De acordo com a Mudança Adiabática, $|\psi_0\rangle$ é o estado fundamental do sistema interagente na representação de Heisenberg, que satisfaz:

$$\hat{H}|\psi_0\rangle = E|\psi_0\rangle. \quad (2.2)$$

$\hat{\psi}_{H\alpha}(\mathbf{x}t)$ é conhecido como operador campo fermiônico na formulação de Heisenberg, cuja dependência temporal é escrita como

$$\hat{\psi}_{H\alpha}(\mathbf{x}t) = e^{i\frac{\hat{H}}{\hbar}t}\hat{\psi}_\alpha(\mathbf{x})e^{-i\frac{\hat{H}}{\hbar}t}, \quad (2.3)$$

onde α e β são índices espinoriais. Para bósons com spin zero, não precisamos de índices. Para elétrons, α e β podem ser spin up ou down cada. Como já vimos, o operador de ordenamento temporal age da seguinte forma:

$$\mathcal{T}[\hat{\psi}_{H\alpha}(\mathbf{x}t)\hat{\psi}_{H\beta}^\dagger(\mathbf{x}'t')] = \begin{cases} \hat{\psi}_{H\alpha}(\mathbf{x}t)\hat{\psi}_{H\beta}^\dagger(\mathbf{x}'t'), & t > t' \\ \pm \hat{\psi}_{H\beta}^\dagger(\mathbf{x}'t')\hat{\psi}_{H\alpha}(\mathbf{x}t), & t' > t \end{cases} \quad (2.4)$$

onde o sinal positivo é usado para os campos bosônicos e o negativo para os fermiônicos. Escrevendo explicitamente a função de Green, temos

$$iG_{\alpha\beta}(\mathbf{x}t, \mathbf{x}'t') = \begin{cases} \frac{\langle \psi_0 | \hat{\psi}_{H\alpha}(\mathbf{x}t)\hat{\psi}_{H\beta}^\dagger(\mathbf{x}'t') | \psi_0 \rangle}{\langle \psi_0 | \psi_0 \rangle}, & t > t' \\ \pm \frac{\langle \psi_0 | \hat{\psi}_{H\beta}^\dagger(\mathbf{x}'t')\hat{\psi}_{H\alpha}(\mathbf{x}t) | \psi_0 \rangle}{\langle \psi_0 | \psi_0 \rangle}, & t' > t. \end{cases} \quad (2.5)$$

Essa é a forma na qual incorporamos o ordenamento temporal na própria definição de Green. Adiante, veremos que os diagramas de Feynman surgem de uma teoria de perturbação para as funções de Green $G_{\alpha\beta}$.

2.1.2 Relação com observáveis

É possível obter observáveis de interesse físico a partir da função de Green. Como exemplo, veremos o valor esperado de qualquer operador de única partícula no estado fundamental do sistema. Considere um operador de uma partícula

$$\hat{J} = \int d^3\mathbf{x} \hat{j}(\mathbf{x}), \quad (2.6)$$

onde $\hat{j}(\mathbf{x})$ é a densidade do operador $\hat{J}$. Na segunda quantização,

$$\hat{j}(\mathbf{x}) = \sum_{\alpha\beta} \hat{\psi}_\beta^\dagger(\mathbf{x}) J_{\beta\alpha}(\mathbf{x}) \hat{\psi}_\alpha(\mathbf{x}). \quad (2.7)$$

O valor esperado desse observável no estado fundamental pode ser obtido da seguinte forma

$$\begin{aligned} \langle \hat{j}(\mathbf{x}) \rangle &\equiv \frac{\langle \psi_0 | \hat{j}(\mathbf{x}) | \psi_0 \rangle}{\langle \psi_0 | \psi_0 \rangle} = \lim_{\mathbf{x}' \rightarrow \mathbf{x}} \sum_{\alpha\beta} J_{\beta\alpha}(\mathbf{x}) \frac{\langle \psi_0 | \hat{\psi}_\beta^\dagger(\mathbf{x}') \hat{\psi}_\alpha(\mathbf{x}) | \psi_0 \rangle}{\langle \psi_0 | \psi_0 \rangle} \\ &= \pm i \lim_{t' \rightarrow t^+} \lim_{\mathbf{x}' \rightarrow \mathbf{x}} \sum_{\alpha\beta} J_{\beta\alpha}(\mathbf{x}) G_{\alpha\beta}(\mathbf{x}t, \mathbf{x}'t') \\ &= \pm i \lim_{t' \rightarrow t^+} \lim_{\mathbf{x}' \rightarrow \mathbf{x}} \text{Tr}[J(\mathbf{x}) G(\mathbf{x}t, \mathbf{x}'t')]. \end{aligned} \quad (2.8)$$

Portanto, para um operador de uma partícula, temos

$$\langle \hat{J}(\mathbf{x}) \rangle = \pm i \lim_{t' \rightarrow t^+} \lim_{\mathbf{x}' \rightarrow \mathbf{x}} \text{Tr}[J(\mathbf{x}) G(\mathbf{x}t, \mathbf{x}'t')]. \quad (2.9)$$

Dado a forma da média do operador de uma partícula, com o auxílio da função de Green, podemos calcular a média da densidade de partículas $\langle \hat{n}(\mathbf{x}) \rangle$, a média da densidade de spin $\langle \hat{\sigma}(\mathbf{x}) \rangle$ e a média da energia cinética total $\langle \hat{T} \rangle$:

$$\begin{aligned} \langle n(\mathbf{x}) \rangle &= \pm i \text{Tr}[G(\mathbf{x}t, \mathbf{x}t^+)], \\ \langle \hat{\sigma}(\mathbf{x}) \rangle &= \pm i \text{Tr}[\hat{\sigma} G(\mathbf{x}t, \mathbf{x}t^+)], \\ \langle \hat{T} \rangle &= \pm i \int d^3\mathbf{x} \lim_{\mathbf{x}' \rightarrow \mathbf{x}} \left[-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} \text{Tr} G(\mathbf{x}t, \mathbf{x}'t^+) \right]. \end{aligned} \quad (2.10)$$

2.1.3 Exemplo - Gás de Elétrons

Como um exemplo do formalismo, vamos considerar a função de Green de um sistema não interagente homogêneo de férmions. Primeiro, é conveniente fazer a transformação canônica para partículas e buracos.

Na definição de campo, vimos que

$$\hat{\psi}(\mathbf{x}) = \sum_{\mathbf{k}\lambda} \psi_{\mathbf{k}\lambda}(\mathbf{x}) c_{\mathbf{k}\lambda}. \quad (2.11)$$

Aqui, $c_{\mathbf{k}\lambda}$ poderá ser o operador fermiônico de criação e aniquilação, onde vamos adotar a seguinte expressão:

$$c_{\mathbf{k}\lambda} = \begin{cases} a_{\mathbf{k}\lambda}, & k > k_F \\ b_{-\mathbf{k}\lambda}^\dagger, & k < k_F. \end{cases} \quad (2.12)$$

Note que $a_{\mathbf{k}\lambda}$ destrói uma possível partícula acima da superfície do mar de Fermi com momento $\mathbf{k}$, e $b_{-\mathbf{k}\lambda}^\dagger$ cria um possível buraco abaixo da superfície do mar de Fermi com momento $-\mathbf{k}$, onde o momento k_F representa o momento da superfície da esfera de Fermi. Temos as relações canônicas de anticomutação:

$$\{a_{\mathbf{k}}, a_{\mathbf{k}'}^\dagger\} = \{b_{\mathbf{k}}, b_{\mathbf{k}'}^\dagger\} = \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}. \quad (2.13)$$

e, além disso,

$$\{a_{\mathbf{k}}, b_{\mathbf{k}}\} = \{a_{\mathbf{k}}, b_{\mathbf{k}}^\dagger\} = \{a_{\mathbf{k}}^\dagger, b_{\mathbf{k}}\} = \{a_{\mathbf{k}}^\dagger, b_{\mathbf{k}}^\dagger\} = 0. \quad (2.14)$$

pois a e b representam modos diferentes, a e b representam partículas e buracos, respectivamente.

Os operadores $a_{\mathbf{k}}$ e $a_{\mathbf{k}}^\dagger$ aniquilam e criam partículas acima do mar de Fermi, respectivamente; já os operadores $b_{\mathbf{k}}$ e $b_{\mathbf{k}}^\dagger$ aniquilam e criam buracos dentro do mar de Fermi. Utilizando tais operadores, podemos definir os campos fermiônicos.

Na formulação de Schrödinger

$$\hat{\psi}_S(\mathbf{x}) = \sum_{\mathbf{k}\lambda > \mathbf{k}_F} \psi_{\mathbf{k}\lambda}(\mathbf{x}) a_{\mathbf{k}\lambda} + \sum_{\mathbf{k}\lambda < \mathbf{k}_F} \psi_{\mathbf{k}\lambda}(\mathbf{x}) b_{-\mathbf{k}\lambda}^\dagger. \quad (2.15)$$

onde o primeiro termo aniquila partículas acima do mar de Fermi, enquanto o segundo termo cria buracos dentro do mar de Fermi. No formalismo de interação, o campo assume a forma

$$\hat{\psi}_I(\mathbf{x}, t) = \sum_{\mathbf{k}\lambda > \mathbf{k}_F} \psi_{\mathbf{k}\lambda}(\mathbf{x}) e^{-i\omega_{\mathbf{k}}t} a_{\mathbf{k}\lambda} + \sum_{\mathbf{k}\lambda < \mathbf{k}_F} \psi_{\mathbf{k}\lambda}(\mathbf{x}) e^{-i\omega_{\mathbf{k}}t} b_{-\mathbf{k}\lambda}^\dagger. \quad (2.16)$$

O hamiltoniano fica:

$$\begin{aligned} \hat{H}_0 &= \sum_{\mathbf{k}\lambda} \hbar\omega_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\lambda}^\dagger c_{\mathbf{k}\lambda}, \\ &= \sum_{\mathbf{k}\lambda > \mathbf{k}_F} \hbar\omega_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}\lambda}^\dagger a_{\mathbf{k}\lambda} - \sum_{\mathbf{k}\lambda < \mathbf{k}_F} \hbar\omega_{\mathbf{k}} b_{\mathbf{k}\lambda}^\dagger b_{\mathbf{k}\lambda} + \sum_{\mathbf{k}\lambda < \mathbf{k}_F} \hbar\omega_{\mathbf{k}}, \end{aligned} \quad (2.17)$$

onde, no lado direito, o primeiro termo representa a energia devido a ocupação das partículas acima do mar de Fermi, o segundo termo representa a energia devido os buracos formados no mar de Fermi e o último termo representa a energia do mar de Fermi preenchido. Criar buraco diminui a energia do sistema, enquanto criar uma partícula

aumenta a energia. Se o número total de partículas for fixo, então, para criar uma partícula acima do mar de Fermi, é necessário criar um buraco no mar de Fermi, além disso, para aniquilar um buraco no mar de Fermi é necessário aniquilar uma partícula acima do mar de Fermi. Com isso, partículas e buracos existem necessariamente em pares, onde cada par buraco-partícula tem uma quantidade de energia positiva. Assim, como o número de partículas deve se manter fixo, e a criação de cada par representa uma quantidade positiva de energia, o estado fundamental é o próprio mar de Fermi.

Por definição, temos a função de Green fermiônica não interagente:

$$iG_{\alpha\beta}^0(\mathbf{x}t, \mathbf{x}'t') = \langle \phi_0 | \mathcal{T}[\hat{\psi}_{I\alpha}(\mathbf{x}t)\hat{\psi}_{I\alpha}^\dagger(\mathbf{x}'t')] | \phi_0 \rangle, \quad (2.18)$$

onde o estado fundamental não interagente é assumidamente normalizado.

Os operadores de destruição de partículas e buracos ambos aniquilam o estado fundamental

$$b_{\mathbf{k}\lambda} |\phi_0\rangle = a_{\mathbf{k}\lambda} |\phi_0\rangle = 0, \quad (2.19)$$

pois não há partículas acima ou buracos abaixo isolados do mar de Fermi. Pela definição do operador de ordenamento temporal, temos que

$$\mathcal{T}[\hat{\psi}_{I\alpha}(\mathbf{x}t)\hat{\psi}_{I\beta}^\dagger(\mathbf{x}'t')] = \hat{\psi}_{I\alpha}(\mathbf{x}t)\hat{\psi}_{I\beta}^\dagger(\mathbf{x}'t')\Theta(t-t') - \hat{\psi}_{I\beta}^\dagger(\mathbf{x}'t')\hat{\psi}_{I\alpha}(\mathbf{x}t)\Theta(t'-t) \quad (2.20)$$

Usando a Equação 2.16 e a Equação 2.20 na Equação 2.18, temos:

$$iG_{\alpha\beta}^0(\mathbf{x}t, \mathbf{x}'t') = \delta_{\alpha\beta} \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{x}-\mathbf{x}')} e^{-i\omega_{\mathbf{k}}(t-t')} [\Theta(t-t')\Theta(k-k_F) - \Theta(t'-t)\Theta(k_F-k)], \quad (2.21)$$

onde assumimos a função de onda da partícula livre

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}. \quad (2.22)$$

Com isso, usando $V \rightarrow \infty$ e usando a representação da Heaviside na forma integral

$$\Theta(t-t') = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi i} \frac{e^{-i(\omega-\omega_{\mathbf{k}})(t-t')}}{\omega - \omega_{\mathbf{k}} + i\eta}, \quad (2.23)$$

obtemos a transformada de Fourier da função de Green da partícula fermiônica no regime não interagente:

$$iG_{\alpha\beta}^0(\mathbf{k}, \omega) = \delta_{\alpha\beta} \left[\frac{\Theta(k-k_F)}{\omega - \omega_{\mathbf{k}} + i\eta} + \frac{\Theta(k_F-k)}{\omega - \omega_{\mathbf{k}} - i\eta} \right], \quad (2.24)$$

a função de Green em termos da frequência ω e do momento $\mathbf{k}$. Note que a função de Green é diagonal devido a delta de Kronecker. Relembrando, a função de Green representa uma amplitude de probabilidade. Entretanto, tal amplitude possui polos de tal forma que a maior contribuição é aquela no qual a frequência ω é próxima de $\omega_{\mathbf{k}}$. Isso significa que é

mais provável que o sistema opte fluir para esses estados no qual possui frequências ω_k , que é justamente a frequência da partícula que foi adicionada ou retirada. Lembrando que o primeiro termo da equação acima representa uma partícula adicionada acima do mar de Fermi, enquanto que o segundo termo representa uma partícula retirada abaixo do mar de Fermi.

2.1.4 Interpretação Física da Função de Green em Segunda Quantização

Até agora, vimos como calcular a função de Green para o caso de férmions livres; vimos também que na representação de energia, a função de Green possui polos que estão relacionados as auto-energias do sistema interagente. Agora estamos interessados em dar uma interpretação física a função de Green.

Para entender a interpretação física da função de Green de uma partícula, é importante considerar o estado no formalismo de interação $|\psi_I(t')\rangle$. A criação de uma partícula no ponto $\mathbf{x}'$ no tempo t' é escrita como

$$\hat{\psi}_{I\beta}^\dagger(\mathbf{x}', t') |\psi_I(t')\rangle. \quad (2.25)$$

Embora este estado não seja um auto-estado do hamiltoniano, ele propaga no tempo de acordo com $\hat{U}(t, t') \hat{\psi}_{I\beta}^\dagger(\mathbf{x}', t') |\psi_I(t')\rangle$. Para $t > t'$, temos:

$$\begin{aligned} \langle \psi_I(t) | \hat{\psi}_{I\alpha}(\mathbf{x}, t) \hat{U}(t, t') \hat{\psi}_{I\beta}^\dagger(\mathbf{x}', t') | \psi_I(t') \rangle &= \langle \phi_0 | \hat{U}(-\infty, t) \times \\ &\times \left[\hat{U}(t, 0) \hat{\psi}_{H\alpha}(\mathbf{x}, t) \hat{U}(0, t) \right] \hat{U}(t, t') \left[\hat{U}(t', 0) \hat{\psi}_{H\beta}^\dagger(\mathbf{x}', t') \hat{U}(0, t') \right] \hat{U}(t', -\infty) | \phi_0 \rangle, \end{aligned} \quad (2.26)$$

onde usamos o fato de que $|\psi_I(t')\rangle = \hat{U}(t', -\infty) | \phi_0 \rangle$ e $\langle \psi_I(t) | = \langle \phi_0 | \hat{U}(-\infty, t)$. Portanto,

$$\begin{aligned} \langle \psi_I(t) | \hat{\psi}_{I\alpha}(\mathbf{x}, t) \hat{U}(t, t') \hat{\psi}_{I\beta}^\dagger(\mathbf{x}', t') | \psi_I(t') \rangle &= \langle \phi_0 | \hat{U}(-\infty, 0) \hat{\psi}_{H\alpha}(\mathbf{x}, t) \hat{\psi}_{H\beta}^\dagger(\mathbf{x}', t') \hat{U}(0, -\infty) | \phi_0 \rangle \\ &= \langle \psi_0 | \hat{\psi}_{H\alpha}(\mathbf{x}, t) \hat{\psi}_{H\beta}^\dagger(\mathbf{x}', t') | \psi_0 \rangle \\ &= \langle \psi_0 | \mathcal{T} \{ \hat{\psi}_{H\alpha}(\mathbf{x}, t) \hat{\psi}_{H\beta}^\dagger(\mathbf{x}', t') \} | \psi_0 \rangle. \end{aligned} \quad (2.27)$$

Essa quantidade é justamente a função de Green para $t > t'$. Assim, a função de Green representa a propagação do estado de uma partícula na formulação de interação. Caso $t < t'$, temos que:

$$\begin{aligned} \langle \psi_I(t') | \hat{\psi}_{I\beta}^\dagger(\mathbf{x}', t') \hat{U}(t', t) \hat{\psi}_{I\alpha}(\mathbf{x}, t) | \psi_I(t) \rangle &= \langle \phi_0 | \hat{U}(-\infty, t') \times \\ &\times \left[\hat{U}(t', 0) \hat{\psi}_{H\beta}^\dagger(\mathbf{x}', t') \hat{U}(0, t') \right] \hat{U}(t', t) \left[\hat{U}(t, 0) \hat{\psi}_{H\alpha}(\mathbf{x}, t) \hat{U}(0, t) \right] \hat{U}(t, -\infty) | \phi_0 \rangle, \end{aligned} \quad (2.28)$$

De forma análoga, $|\psi_I(t)\rangle = \hat{U}(t, -\infty) |\phi_0\rangle$ e $\langle\psi_I(t')| = \langle\phi_0| \hat{U}(-\infty, t')$. Assim, obtemos o seguinte resultado:

$$\begin{aligned} \langle\psi_I(t')| \hat{\psi}_{I\beta}^\dagger(\mathbf{x}', t') \hat{U}(t', t) \hat{\psi}_{I\alpha}(\mathbf{x}, t) |\psi_I(t)\rangle &= \langle\phi_0| \hat{U}(-\infty, 0) \hat{\psi}_{H\beta}^\dagger(\mathbf{x}', t') \hat{\psi}_{H\alpha}(\mathbf{x}, t) \hat{U}(0, -\infty) |\phi_0\rangle \\ &= \langle\psi_0| \hat{\psi}_{H\beta}^\dagger(\mathbf{x}', t') \hat{\psi}_{H\alpha}(\mathbf{x}, t) |\psi_0\rangle \\ &= -\langle\psi_0| \mathcal{T}\{\hat{\psi}_{H\alpha}(\mathbf{x}, t) \hat{\psi}_{H\beta}^\dagger(\mathbf{x}', t')\} |\psi_0\rangle. \end{aligned} \quad (2.29)$$

Como estamos trabalhando com Férmons, e sabendo que os operadores campos anti-comutam, temos:

$$iG_{\alpha\beta}(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}', t') = \begin{cases} \frac{\langle\psi_0| \hat{\psi}_{H\alpha}(\mathbf{x}, t) \hat{\psi}_{H\beta}^\dagger(\mathbf{x}', t') |\psi_0\rangle}{\langle\psi_0| \psi_0\rangle}, & \text{se } t > t' \\ -\frac{\langle\psi_0| \hat{\psi}_{H\beta}^\dagger(\mathbf{x}', t') \hat{\psi}_{H\alpha}(\mathbf{x}, t) |\psi_0\rangle}{\langle\psi_0| \psi_0\rangle}, & \text{se } t' > t. \end{cases} \quad (2.30)$$

Portanto, desconsiderando o fator de normalização:

$$iG_{\alpha\beta}(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}', t') = \begin{cases} \langle\psi_I(t)| \hat{\psi}_{I\alpha}(\mathbf{x}, t) \hat{U}(t, t') \hat{\psi}_{I\beta}^\dagger(\mathbf{x}', t') |\psi_I(t')\rangle, & \text{se } t > t' \\ -\langle\psi_I(t')| \hat{\psi}_{I\beta}^\dagger(\mathbf{x}', t') \hat{U}(t', t) \hat{\psi}_{I\alpha}(\mathbf{x}, t) |\psi_I(t)\rangle, & \text{se } t' > t. \end{cases} \quad (2.31)$$

Isso diz basicamente que o buraco pode ser interpretado como uma partícula indo no sentido contrário do tempo. Para uma partícula criada no ponto $\mathbf{x}'$ e tempo t' , $G(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}', t')$ representa a amplitude de probabilidade do estado $\hat{U}(t, t') \hat{\psi}_{I\beta}^\dagger(\mathbf{x}', t') |\psi_I(t')\rangle$ projetado em $\hat{\psi}_{I\alpha}^\dagger(\mathbf{x}, t) |\psi_I(t)\rangle$. Já para um buraco criado no ponto $\mathbf{x}$ no tempo t , $G(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}', t')$ representa a projeção do estado $\hat{U}(t', t) \hat{\psi}_{I\alpha}(\mathbf{x}, t) |\psi_I(t)\rangle$ em $\hat{\psi}_{I\beta}^\dagger(\mathbf{x}', t') |\psi_I(t')\rangle$, onde o sentido de propagação para elétrons e buracos é mostrado na Figura 6.

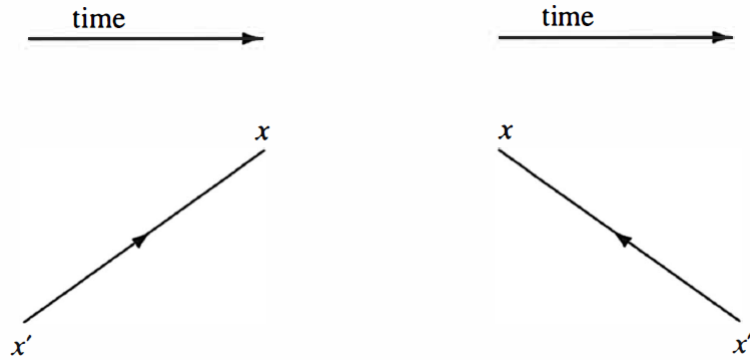


Figura 6 – A primeira seta representa uma partícula; a segunda, um buraco. x e x' representam os pontos $(\mathbf{x}, t)$ e $(\mathbf{x}', t')$, respectivamente. Figura retirada de (FETTER; WALECKA, 2003).

2.1.5 Teorema de Wick e os Diagramas de Feynman

Até aqui vimos que a função de Green de uma partícula é definida pela Equação 2.1. Entretanto, nosso interesse é calcular a função de Green a partir de uma teoria de

perturbação. Como vimos, a função de Green é escrita em termos de operadores na representação de Heisenberg. A relação entre a representação de Heisenberg e de interação de um operador $\hat{O}$ é dada por:

$$\frac{\langle \psi_0 | \hat{O}_H(t) | \psi_0 \rangle}{\langle \psi_0 | \psi_0 \rangle} = \frac{1}{\langle \phi_0 | \hat{S} | \phi_0 \rangle} \langle \phi_0 | \sum_{\nu=0}^{\infty} \left(\frac{-i}{\hbar} \right)^{\nu} \frac{1}{\nu!} \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \dots \dots \int_{-\infty}^{\infty} dt_{\nu} e^{-\epsilon(|t_1|+\dots+|t_{\nu}|)} \mathcal{T}[\hat{H}_I(t_1) \dots \hat{H}_I(t_{\nu}) \hat{O}_I(t)] | \phi_0 \rangle \quad (2.32)$$

De forma similar, a função de Green fica:

$$iG_{\alpha\beta}(x, y) = \frac{\langle \psi_0 | \hat{\psi}_{\alpha H}(x) \hat{\psi}_{\beta H}^{\dagger}(y) | \psi_0 \rangle}{\langle \psi_0 | \psi_0 \rangle} = \frac{1}{\langle \phi_0 | \hat{S} | \phi_0 \rangle} \langle \phi_0 | \sum_{\nu=0}^{\infty} \left(\frac{-i}{\hbar} \right)^{\nu} \frac{1}{\nu!} \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \dots \dots \int_{-\infty}^{\infty} dt_{\nu} e^{-\epsilon(|t_1|+\dots+|t_{\nu}|)} \mathcal{T}[\hat{H}_I(t_1) \dots \hat{H}_I(t_{\nu}) \hat{\psi}_{\alpha}(x) \hat{\psi}_{\beta}^{\dagger}(y)] | \phi_0 \rangle, \quad (2.33)$$

onde usamos a notação $x = (\mathbf{x}, t_x)$.

Durante o desenvolvimento da teoria quântica de campos, havia um interesse em calcular a média de certos observáveis, ou até mesmo a matriz de espalhamento, de forma perturbativa Equação (1.33) usando um determinado hamiltoniano de interação $\hat{H}_I(t)$. Entretanto, era necessário calcular diversas ordens, cada ordem apresentando uma complexidade maior a medida que aumentava a quantidade de campos. Desta forma, (WICK, 1950) formulou um teorema que simplifica o cálculo dos termos, como por exemplo

$$\langle \phi_0 | \mathcal{T}\{\hat{\psi}(t)\hat{\psi}^{\dagger}(t')\hat{\psi}^{\dagger}(t_1)\hat{\psi}^{\dagger}(t_2)\hat{\psi}(t_2)\hat{\psi}(t_1)\} | \phi_0 \rangle, \quad (2.34)$$

onde $|\phi_0\rangle$ representa o estado fundamental do sistema não-interagente e os $\hat{\psi}^{\dagger}$ e $\hat{\psi}$ representam operadores de criação e aniquilação fermiônicos, respectivamente.

Wick definiu um operador chamado de ordenamento normal N . Este operador aplicado em um produto de campos como na Equação (2.34) produz contribuições identicamente nulas nos termos na matriz de espalhamento, ou a função de Green. Os únicos termos que sobrevivem são os termos em que todos os operadores de criação e aniquilação são contraídos, que estão associados as funções de Green no regime não perturbativo $iG_{\alpha\beta}^0(x, y)$. Assim, a função de Green perturbativa é escrita em termos da função de Green não perturbativa e das interações. Como exemplo, podemos calcular a primeira ordem da

função de Green para uma partícula (FETTER; WALECKA, 2003):

$$\begin{aligned}
 i\mathcal{G}_{\alpha\beta}^{(1)} = & \frac{-i}{\hbar} \frac{1}{2} \sum_{\lambda\lambda'\mu\mu'} \int d^4x_1 d^4x'_1 U(x_1, x'_1)_{\lambda\lambda'\mu\mu'} \times \\
 & \times \left\{ iG_{\alpha\beta}^0(x, y) \underbrace{[iG_{\mu'\mu}^0(x'_1, x'_1)iG_{\lambda'\lambda}^0(x_1, x_1)]}_{(A)} - \underbrace{[iG_{\mu'\lambda}^0(x'_1, x_1)iG_{\lambda'\mu}^0(x_1, x'_1)]}_{(B)} \right. \\
 & + iG_{\alpha\lambda}^0(x, x_1) \underbrace{[iG_{\lambda'\mu}^0(x_1, x'_1)iG_{\mu'\beta}^0(x'_1, y)]}_{(C)} - \underbrace{[iG_{\lambda'\beta}^0(x_1, y)iG_{\mu'\mu}^0(x'_1, x'_1)]}_{(D)} \\
 & \left. + iG_{\alpha\mu}^0(x, x'_1) \underbrace{[iG_{\mu'\lambda}^0(x'_1, x_1)iG_{\lambda'\beta}^0(x_1, y)]}_{(E)} - \underbrace{[iG_{\mu'\beta}^0(x'_1, y)iG_{\lambda'\lambda}^0(x_1, x_1)]}_{(F)} \right\}, \quad (2.35)
 \end{aligned}$$

onde $U(x_1, x'_1)$ representa a interação entre os férmions. Os termos (A), (B), (C), (D), (E) e (F) podem ser vistos em forma de diagramas na Figura 7 graças ao (FEYNMAN, 1949):

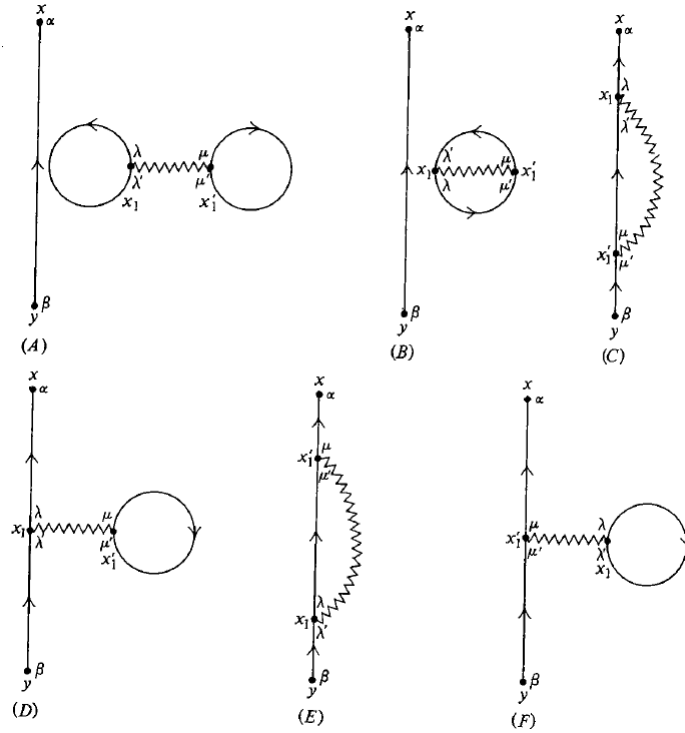


Figura 7 – Diagramas de Feynman, estas são as contribuições de primeira ordem de $iG_{\alpha\beta}$ (6 contribuições). Figura retirada de (FETTER; WALECKA, 2003).

Note que no diagrama (A) e (B) os propagadores $iG_{\alpha\beta}^0(x, y)$ aparecem separado do diagrama restante. Matematicamente, quando isso acontece, ocorre uma fatorização de $iG_{\alpha\beta}^0(x, y)$ em relação aos outros termos. Os diagramas separados de $iG_{\alpha\beta}^0(x, y)$ em (A) e (B) são chamados de diagramas desconexos. Todos os outros casos, (C), (D), (E) e (F), são diagramas conexos.

A quantidade $i\mathcal{G}_{\alpha\beta}(x, y)$ pode ser escrita como um produto de diagramas conexos e desconexos, isto é, $i\mathcal{G} = iG \times \text{parte desconexa}$; entretanto, os diagramas desconexos

apresentam divergências. Por outro lado, quando calculamos a matriz de espalhamento, $\langle \phi_0 | \hat{S} | \phi_0 \rangle$, obtemos os termos desconexos que se cancelam com àqueles existentes na função de Green perturbativa, eliminando divergências. Assim,

$$\frac{i\mathcal{G}}{\langle \phi_0 | \hat{S} | \phi_0 \rangle} = \frac{iG \times \text{parte desconexa}}{\langle \phi_0 | \hat{S} | \phi_0 \rangle} = iG. \quad (2.36)$$

Portanto, a função de Green é escrita como:

$$\begin{aligned} iG_{\alpha\beta}(x, y) = & \langle \phi_0 | \sum_{\nu=0}^{\infty} \left(\frac{-i}{\hbar} \right)^{\nu} \frac{1}{\nu!} \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \dots \\ & \dots \int_{-\infty}^{\infty} dt_{\nu} e^{-\epsilon(|t_1| + \dots + |t_{\nu}|)} \mathcal{T}[\hat{H}_I(t_1) \dots \hat{H}_I(t_{\nu}) \hat{\psi}_{\alpha}(x) \hat{\psi}_{\beta}^{\dagger}(y)] | \phi_0 \rangle_{\text{conexos}}, \end{aligned} \quad (2.37)$$

onde agora só há diagramas conexos.

As diversas contribuições da função de Green perturbativa $iG_{\alpha\beta}(x, y)$ possuem uma estrutura similar: A função de Green perturbativa $iG_{\alpha\beta}(x, y)$ pode ser escrita de forma simplificada por:

$$G_{\alpha\beta}(x, y) = G_{\alpha\beta}^0(x, y) + \int d^4x_1 \int d^4x'_1 G_{\alpha\lambda}^0(x, x_1) \Sigma(x_1, x'_1)_{\lambda\mu} G_{\mu\beta}^0(x'_1, y), \quad (2.38)$$

onde $\Sigma(x_1, x'_1)_{\lambda\mu}$ é chamada de auto-energia (*self-energy*) e sua representação diagramática é dada pela Figura 8.

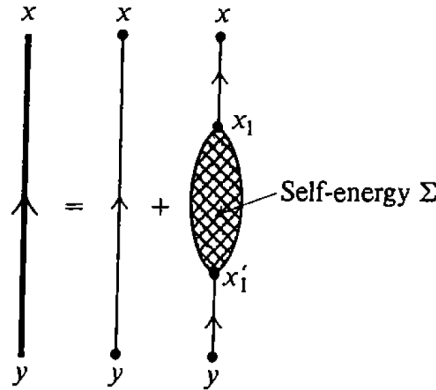


Figura 8 – Estrutura geral da função de Green $G_{\alpha\beta}$. Figura retirada (FETTER; WALECKA, 2003).

Na auto-energia estão inseridas todas as contribuições das interações. Usualmente, as interações estudadas em física da matéria condensada são eletromagnética ou fônons, que são modos de excitação de uma rede cristalina.

Dada a auto-energia, podemos definir a auto-energia própria Σ^* (*proper self-energy*), que consiste em um diagrama que não pode ser separado em duas partes ao cortar uma linha de férmion. Pela Figura 9, podemos ver um exemplo de um diagrama 9-(a) que pode ser cortado em duas partes, gerando dois diagramas de primeira ordem. Já no

diagrama 9-(b), não é possível encontrar um corte que gere dois diagramas. Dizemos que o diagrama 9-(a) é uma inserção da auto-energia imprópria, enquanto que o diagrama 9-(b) é uma inserção da auto-energia própria. A auto-energia própria Σ^* é a soma de todos os diagramas da auto-energia própria.

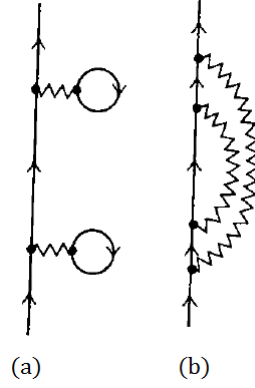


Figura 9 – Diagramas de segunda ordem; o caso (a) representa uma inserção da auto-energia imprópria, enquanto que o caso (b) representa uma inserção da auto-energia própria. Figura retirada (FETTER; WALECKA, 2003).

Com a definição da auto-energia própria, obtemos a equação de Dyson

$$G_{\alpha\beta}(x, y) = G_{\alpha\beta}^0(x, y) + \int d^4x_1 d^4x'_1 G_{\alpha\lambda}^0(x, x_1) \Sigma^*(x_1, x'_1)_{\lambda\mu} G_{\mu\beta}(x'_1, y). \quad (2.39)$$

Note que há funções de Green interagentes G dos dois lados da equação. Assim, ordens superiores da perturbação podem ser obtidas por iterações.

Toda essa formulação está baseada na hipótese da mudança adiabática. Entretanto, em sistemas fora do equilíbrio, onde ocorrem perturbações por campos ou forças externas, é necessário generalizar o conceito de função de Green para estes tipos de fenômenos. Dessa forma, o formalismo de Keldysh será a abordagem feita aqui com o objetivo de estudar fenômenos fora do equilíbrio.

3 Formalismo de Keldysh

3.1 Introdução

(KELDYSH et al., 1965) propôs uma generalização da teoria da função de Green para processos em não-equilíbrio, isto é, quando o hamiltoniano $\hat{H}$ depende do tempo de uma forma geral. Na época, a teoria quântica de campos estava desenvolvida para o caso de equilíbrio, que toma como hipótese a Mudança Adiabática para expressar a função de Green perturbativa $G_{\alpha\beta}(x, y)$ em termos da função de Green não perturbativa $G_{\alpha\beta}^0(x, y)$ e da interação U . Além disso, (MATSUBARA, 1955) havia mostrado que era possível estender a estrutura matemática da teoria de perturbação para fenômenos físicos com temperatura finita. Esta abordagem consiste em realizar uma transformação do tipo $t \rightarrow i\beta$, onde $\beta = 1/k_B T$; onde k_B é a constante de Boltzmann e T é a temperatura do sistema. Embora seja possível reformular toda teoria perturbativa e obter observáveis termodinâmicos do sistema, tal transformação leva a uma perda de significado físico da função de Green como propagador no tempo.

Ambas as abordagens, em $T = 0$ e T finito, requerem a hipótese de Mudança Adiabática para a descrição perturbativa da função de Green. Entretanto, Keldysh e Julian Schwinger estavam interessados em processos nos quais não eram possíveis assumir a existência de um estado $|\psi_0\rangle$ fundamental bem conhecido no regime de interação. Em processos de não-equilíbrio, em geral, só temos conhecimento do estado inicial do sistema, desta forma não poderíamos usufruir do estado $|\psi_0\rangle$ obtido em uma específica dependência temporal do hamiltoniano $\hat{H}$.

Assim, o Formalismo de Keldysh (Formalismo de Green de Não-Equilíbrio) é constituído pela ideia de um contorno temporal e pela técnica de continuação analítica.

3.2 Ideia do Contorno

A ideia do contorno de Keldysh-Schwinger surge para evitar escrever a função de Green perturbativa em termos do estado do sistema interagente $|\psi_0\rangle$, como na Equação 2.1, e passar a escrever em termos de $|\phi_0\rangle$, que é o estado do sistema não-interagente.

Faremos uma análise do contorno temporal em função de um operador genérico $\hat{\mathcal{O}}$, depois assumiremos que $\hat{\mathcal{O}} = \hat{\psi}_{H\alpha} \hat{\psi}_{H\beta}^\dagger$, que será a função de Green. Considere que o sistema foi preparado em um $|\psi(t_0)\rangle \equiv |\psi_0\rangle$, onde o tempo t_0 representa um tempo inicial. A evolução da média do observável $\hat{\mathcal{O}}$ é dado por

$$\langle \mathcal{O} \rangle(t) = \langle \psi(t) | \hat{\mathcal{O}}(t) | \psi(t) \rangle = \langle \psi_0 | \hat{U}(t_0, t) \hat{\mathcal{O}}(t) \hat{U}(t, t_0) | \psi_0 \rangle, \quad (3.1)$$

onde fazemos a leitura da ultima igualdade da seguinte forma: Um estado $|\psi_0\rangle$ é preparado em t_0 e evolui de t_0 ao tempo t de acordo com a evolução $\hat{U}(t, t_0)$. Após isso, o operador $\hat{O}$ atua sobre o estado no tempo t e então ele evolui do tempo t ao tempo t_0 de acordo com a evolução $\hat{U}(t_0, t)$, retornando ao estado $|\psi_0\rangle$.

Para $t > t_0$, o valor esperado pode ser escrito em termos do operador de ordenamento cronológico e anticronológico. Assim,

$$\langle \mathcal{O} \rangle(t) = \langle \psi_0 | \bar{T} \{ e^{-i \int_{t_0}^{t_0} d\bar{t} \hat{H}(\bar{t})} \} \hat{O}(t) T \{ e^{-i \int_{t_0}^t d\bar{t} \hat{H}(\bar{t})} \} | \psi_0 \rangle, \quad (3.2)$$

onde T é o operador de ordenamento temporal cronológico e atua ordenando operadores com tempos inferiores mais à direita; enquanto que $\bar{T}$ é o operador de ordenamento temporal anti-cronológico e age de forma contrária ao T .

Assim, definiremos um contorno temporal no plano complexo do tipo:

$$\gamma \equiv (t_0, t) \oplus (t, t_0) = \gamma_- \oplus \gamma_+, \quad (3.3)$$

onde chamamos γ_- e γ_+ são os ramos cronológico e anti-cronológico, respectivamente, e são representados pela Figura 10.

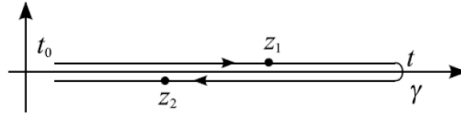


Figura 10 – Contorno γ no plano complexo, onde o ponto z_1 e z_2 estão sobre γ_- e γ_+ , respectivamente. Figura retirada (STEFANUCCI; LEEUWEN, 2013).

Um ponto qualquer z' definido sobre o contorno pode estar sobre γ_- , que será denotado por $z' = t'_-$, ou pode estar sobre γ_+ , denotado por $z' = t'_+$. Nesse caso, um operador $\hat{A}(z')$ fica definido sobre o contorno da seguinte forma:

$$\hat{A}(z') \equiv \begin{cases} \hat{A}_-(t'), & \text{se } z' = t'_- \\ \hat{A}_+(t'), & \text{se } z' = t'_+. \end{cases} \quad (3.4)$$

Em geral, o operador é diferente no sentido cronológico e anticronológico mesmo que a parte real do tempo seja a mesma em ambos os casos. Se um argumento z_1 for mais próximo do ponto de partida que o z_2 no contorno, então dizemos que $z_2 > z_1$. Assim, definiremos um operador de ordenamento temporal $\mathcal{T}_c$ sobre o contorno da Figura 10. $\mathcal{T}_c$ atuará da seguinte forma:

$$\mathcal{T}_c \{ \hat{A}(z_1) \hat{B}(z_2) \} = \begin{cases} T \{ \hat{A}_-(t_1) \hat{B}_-(t_2) \} & , \text{ se } z_1 = t_{1-} \text{ e } z_2 = t_{2-} \\ \hat{A}_+(t_1) \hat{B}_-(t_2) & , \text{ se } z_1 = t_{1+} \text{ e } z_2 = t_{2-} \\ \hat{B}_+(t_2) \hat{A}_-(t_1) & , \text{ se } z_1 = t_{1-} \text{ e } z_2 = t_{2+} \\ \bar{T} \{ \hat{A}_+(t_1) \hat{B}_+(t_2) \} & , \text{ se } z_1 = t_{1+} \text{ e } z_2 = t_{2+}. \end{cases} \quad (3.5)$$

Assim, definido $\mathcal{T}_c$, obtemos:

$$\begin{aligned}
 \langle \mathcal{O} \rangle(t) &= \langle \psi_0 | \bar{T} \{ e^{-i \int_{t_0}^t d\bar{t} \hat{H}(\bar{t})} \} \hat{O}(t) T \{ e^{-i \int_{t_0}^t d\bar{t} \hat{H}(\bar{t})} \} | \psi_0 \rangle, \\
 &= \int_{t_0}^t dt_1 \dots dt_n \int_{t_0}^t dt'_1 \dots dt'_m \langle \psi_0 | \bar{T} \{ \hat{H}(t_1) \dots \hat{H}(t_n) \} \hat{O}(t_\pm) T \{ \hat{H}(t'_1) \dots \hat{H}(t'_m) \} | \psi_0 \rangle \\
 &= \int_{\gamma_+} dz_1 \dots dz_n \int_{\gamma_-} dz'_1 \dots dz'_m \langle \psi_0 | \mathcal{T}_c \{ \hat{H}(z_1) \dots \hat{H}(z_n) \hat{O}(z) \hat{H}(z'_1) \dots \hat{H}(z'_m) \} | \psi_0 \rangle \\
 &= \langle \psi_0 | \mathcal{T} \{ e^{\frac{-i}{\hbar} \int_{\gamma_+} d\bar{z} \hat{H}(\bar{z})} \hat{O}(z) e^{\frac{-i}{\hbar} \int_{\gamma_-} d\bar{z} \hat{H}(\bar{z})} \} | \psi_0 \rangle. \\
 &= \langle \psi_0 | \mathcal{T} \{ e^{\frac{-i}{\hbar} \int_{\gamma} d\bar{z} \hat{H}(\bar{z})} \hat{O}(z) \} | \psi_0 \rangle,
 \end{aligned} \tag{3.6}$$

onde $\int_{\gamma} = \int_{\gamma_-} + \int_{\gamma_+}$.

O fato de estudarmos o caminho de integração de t_0 a t implica que o tamanho do contorno depende diretamente de t . Seria importante encontrar um contorno universal no qual seu tamanho não mude com a mudança do tempo. Este contorno é conhecido como contorno de Keldysh-Schwinger, mostrado na Figura 11, e é obtido pela seguinte constatação:

$$\begin{cases} \mathcal{T} \{ e^{\frac{-i}{\hbar} \int_{\gamma} d\bar{z} \hat{H}(\bar{z})} \hat{O}(t_-) \} = \hat{U}(t_0, \infty) \hat{U}(\infty, t) \hat{O}(t) \hat{U}(t, t_0) = \hat{U}(t_0, t) \hat{O}(t) \hat{U}(t, t_0) \\ \mathcal{T} \{ e^{\frac{-i}{\hbar} \int_{\gamma} d\bar{z} \hat{H}(\bar{z})} \hat{O}(t_+) \} = \hat{U}(t_0, t) \hat{O}(t) \hat{U}(t, \infty) \hat{U}(\infty, t_0) = \hat{U}(t_0, t) \hat{O}(t) \hat{U}(t, t_0), \end{cases} \tag{3.7}$$

isto é, independente do ramo do operador $\hat{O}$, os dois casos são os mesmos.

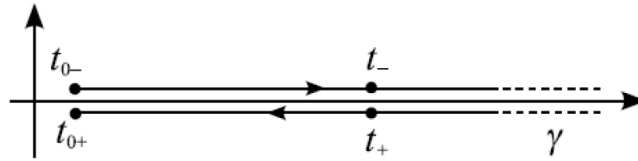


Figura 11 – Contorno de Keldysh-Schwinger. Figura retirada (STEFANUCCI; LE-EUWEN, 2013).

Como complemento, podemos mencionar que é possível descrever um sistema em que estava em um banho térmico inicialmente. Para a mecânica quântica estatística, a descrição do sistema está associado a um operador densidade $\hat{\rho}$. Se o sistema está acoplado com um reservatório térmico, o operador densidade do sistema em equilíbrio térmico é dado por:

$$\hat{\rho} = \frac{e^{-\beta \hat{H}^M}}{Z}, \tag{3.8}$$

com a função de partição:

$$Z \equiv \sum_k e^{-\beta E_k^M} = \text{Tr} \left[e^{-\beta \hat{H}^M} \right], \quad (3.9)$$

onde o índice M é devido a Matsubara, que se atentou ao estudo da função de Green de sistemas em equilíbrio térmico.

O argumento pode ser estendido ao reservatório de partículas utilizando o hamiltoniano do tipo:

$$\hat{H}^M = \hat{H} - \mu \hat{N} \quad \text{e} \quad \beta = \frac{1}{K_B T}, \quad (3.10)$$

onde $\hat{H}$ é o hamiltoniano do sistema e K_B é a constante de Boltzmann.

A média de um observável $\hat{O}$ de acordo com a teoria de não-equilíbrio fica:

$$\begin{aligned} \langle \mathcal{O} \rangle(z) &= \text{Tr} \left[\rho \hat{U}(t_0, t) \hat{O} \hat{U}(t, t_0) \right] = \text{Tr} \left[\rho \mathcal{T} \left\{ e^{\frac{-i}{\hbar} \int_{\gamma} d\bar{z} \hat{H}(\bar{z})} \hat{O}(z) \right\} \right], \\ &= \frac{\text{Tr} \left[e^{-\beta \hat{H}^M} \mathcal{T} \left\{ e^{\frac{-i}{\hbar} \int_{\gamma} d\bar{z} \hat{H}(\bar{z})} \hat{O}(z) \right\} \right]}{\text{Tr} \left[e^{-\beta \hat{H}^M} \right]}. \end{aligned} \quad (3.11)$$

Podemos considerar uma extensão do contorno da Figura 11, onde

$$e^{-\beta \hat{H}^M} = e^{\frac{-i}{\hbar} \int_{\gamma^M} d\bar{z} \hat{H}^M}, \quad (3.12)$$

γ^M sendo qualquer contorno no plano complexo começando de z_a e terminando em z_b , como por exemplo na Figura 12 tal que $z_b - z_a = -i\hbar\beta$. Chamamos o contorno γ^M de contorno de Matsubara.

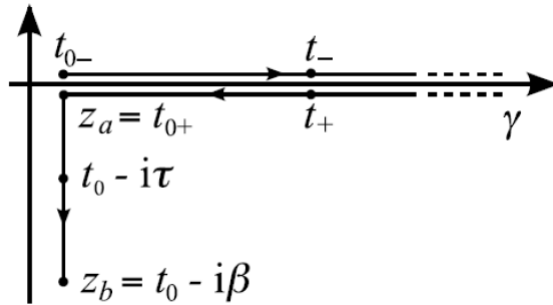


Figura 12 – Contorno do tipo $\gamma \oplus \gamma^M$, onde o contorno de Matsubara γ^M começa em $z_a = t_{0-}$ e termina em $z_b = t_{0+} - i\hbar\beta$. Figura retirada (STEFANUCCI; LEEUWEN, 2013).

Desta forma, a média do observável $\hat{O}$ fica:

$$\mathcal{O}(z) = \frac{\text{Tr} \left[e^{\frac{-i}{\hbar} \int_{\gamma} d\bar{z} \hat{H}^M} \mathcal{T} \left\{ e^{\frac{-i}{\hbar} \int_{\gamma} d\bar{z} \hat{H}(\bar{z})} \hat{O}(z) \right\} \right]}{\text{Tr} \left[e^{\frac{-i}{\hbar} \int_{\gamma} d\bar{z} \hat{H}^M} \mathcal{T} \left\{ e^{\frac{-i}{\hbar} \int_{\gamma} d\bar{z} \hat{H}(\bar{z})} \right\} \right]} = \frac{\text{Tr} \left[\mathcal{T} \left\{ e^{\frac{-i}{\hbar} \int_{\gamma} d\bar{z} \hat{H}(\bar{z})} \hat{O}(z) \right\} \right]}{\text{Tr} \left[\mathcal{T} \left\{ e^{\frac{-i}{\hbar} \int_{\gamma} d\bar{z} \hat{H}(\bar{z})} \right\} \right]}. \quad (3.13)$$

Note que a estrutura da média do operador $\hat{O}$ em termos dos operadores hamiltonianos e do operador de ordenamento temporal é sempre a mesma, o que muda é o contorno de integração que fazemos. Podemos calcular a média do observável $\hat{O}$ por uma teoria de perturbação de equilíbrio e não-equilíbrio, basta escolher o contorno adequado. Por exemplo, para temperatura nula e a hipótese de Mudança Adiabática, representaremos o $\hat{H}_{\eta}$ da Equação 1.31 e o contorno pode ser visto na Figura 13.

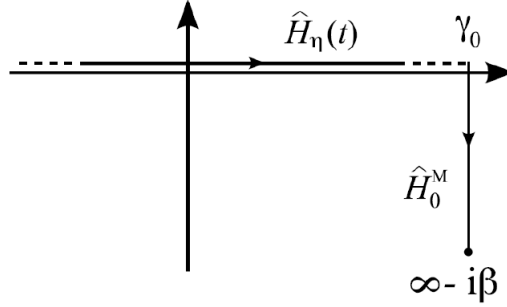


Figura 13 – Contorno temporal adaptado a hipótese de Mudança Adiabática. Figura retirada (STEFANUCCI; LEEUWEN, 2013).

3.3 Técnica de Continuação Analítica

Na seção anterior, estávamos falando de integrações em contornos imaginários com o objetivo de obter uma estrutura matemática semelhante ao formalismo de equilíbrio; entretanto para obtermos a conexão com a física, é necessário que os operadores sejam escritos em termos de parâmetros reais que correspondem às variáveis temporais. Dessa forma, veremos a técnica de continuação analítica, introduzidas por (LANGRETH et al., 1976).

Para isso, vamos introduzir algumas novas definições da função de Green. Considerando um reservatório térmico em $t \rightarrow -\infty$, vimos que a função de Green pode ser escrita da seguinte forma

$$G(1, 1') \equiv -i \langle T_{\gamma} [\psi_H(1) \psi_H^{\dagger}(1')] \rangle, \quad (3.14)$$

onde γ representa o contorno da Figura 12. Como o contorno consiste de partes $(-\infty, \infty)$ e $(\infty, -\infty)$, a função de Green ordenada no contorno contém 4 diferentes funções

$$G(1, 1') = \begin{cases} G_c(1, 1'), & t_1, t_{1'} \in C_1 \\ G^>(1, 1'), & t_1 \in C_2, t_{1'} \in C_1 \\ G^<(1, 1'), & t_1 \in C_1, t_{1'} \in C_2 \\ G_{\tilde{c}}(1, 1'), & t_1, t_{1'} \in C_2, \end{cases} \quad (3.15)$$

onde indicaremos agora C_1 pelo ramo de cima do contorno e C_2 pelo ramo de baixo. A função de Green causal, ou ordenada no tempo, G_c é definida por

$$\begin{aligned} G_c(1, 1') &= -i \langle T[\psi_H(1)\psi_H^\dagger(1')] \rangle \\ &= -i\theta(t_1 - t_{1'}) \langle \psi_H(1)\psi_H^\dagger(1') \rangle + i\theta(t_{1'} - t_1) \langle \psi_H^\dagger(1')\psi_H(1) \rangle, \end{aligned} \quad (3.16)$$

a função maior por $G^>$,

$$G^>(1, 1') = -i \langle \psi_H(1)\psi_H^\dagger(1') \rangle, \quad (3.17)$$

a menor por $G^<$,

$$G^<(1, 1') = i \langle \psi_H^\dagger(1')\psi_H(1) \rangle, \quad (3.18)$$

e a função de Green anti-ordenada no tempo $G_{\tilde{c}}$,

$$\begin{aligned} G_{\tilde{c}}(1, 1') &= -i \langle \tilde{T}[\psi_H(1)\psi_H^\dagger(1')] \rangle \\ &= -i\theta(t_{1'} - t_1) \langle \psi_H(1)\psi_H^\dagger(1') \rangle + i\theta(t_1 - t_{1'}) \langle \psi_H^\dagger(1')\psi_H(1) \rangle. \end{aligned} \quad (3.19)$$

Como $G_c + G_{\tilde{c}} = G^< + G^>$, temos 3 funções linearmente independentes. As funções $G^>, G^<$ são conhecidas por funções correlação, e as funções de Green avançada e retardada são definidas por

$$\begin{aligned} G^a(1, 1') &= i\theta(t_{1'} - t_1) \langle \{\psi_H(1), \psi_H^\dagger(1')\} \rangle \\ &= \theta(t_{1'} - t_1)[G^<(1, 1') - G^>(1, 1')], \end{aligned} \quad (3.20)$$

e

$$\begin{aligned} G^r(1, 1') &= -i\theta(t_1 - t_{1'}) \langle \{\psi_H(1), \psi_H^\dagger(1')\} \rangle \\ &= \theta(t_1 - t_{1'})[G^>(1, 1') - G^<(1, 1')]. \end{aligned} \quad (3.21)$$

Observe que $G^r - G^a = G^> - G^<$. Lembrando que as chaves na forma $\{, \}$ representam o anticomutador.

Até aqui, falamos somente sobre as novas formas da função de Green. O nosso desejo é obter integrações em relação ao tempo real. Para isso, é necessário expressar a equação de Dyson em termos das funções de Green $G_c, G_{\tilde{c}}, G^a, G^r, G^>$ e $G^<$.

Considerando a equação de Dyson, encontramos termos com estrutura $C = AB$, ou,

$$C(t_1, t_{1'}) = \int_C d\tau A(t_1, \tau) B(\tau, t_{1'}). \quad (3.22)$$

Podemos também perceber que há termos com três ou mais fatores, e com isso podemos generalizar o resultado. Vamos assumir agora que t_1 está no ramo de cima do contorno de integração, isto é, o ramo que vai de $-\infty$ até ∞ , enquanto que $t_{1'}$ está no ramo de baixo do contorno. Assim, se $t_1 \in (-\infty, \infty)$ e $t_{1'} \in (\infty, -\infty)$, temos a função de Green menor nessa configuração.

O que vamos fazer agora é deformar o contorno de acordo com a Figura 14. Assim, a Equação 3.22 fica

$$C^<(t_1, t_{1'}) = \int_{C_1} d\tau A(t_1, \tau) B^<(\tau, t_{1'}) + \int_{C_{1'}} d\tau A^<(t_1, \tau) B(\tau, t_{1'}). \quad (3.23)$$

Atentando-nos ao primeiro termo do lado direito, devemos observar que, pelo fato de

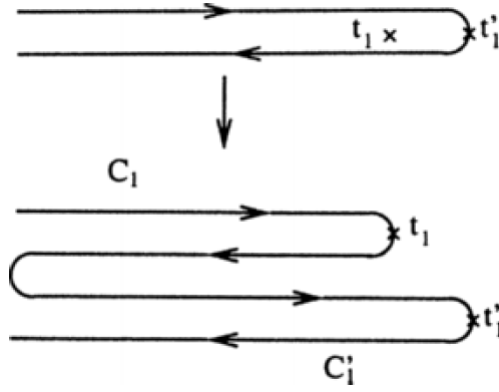


Figura 14 – Deformação do contorno. Imagem retirada de (HAUG; JAUHO, 2008).

t_1 e τ pertencerem a C_1 , temos que $A(t_1, \tau)$ não possui nenhum índice. Por outro lado, como $\tau \in C_1$ e $t_{1'} \in C_{1'}$, temos que $B(\tau, t_{1'}) = B^<(\tau, t_{1'})$. Fazendo a mesma análise para o segundo termo do lado direito, temos que $t_1 \in C_1$ enquanto que $\tau \in C_{1'}$ faz com que $A(t_1, \tau) = A^<(t_1, \tau)$. De forma análoga, $\tau \in C_{1'}$ e $t_{1'} \in C_{1'}$ faz com que $B(\tau, t_{1'})$ não tenha índices.

Além disso, é importante observar que o contorno C_1 é constituído pelo ramo $(-\infty, t_1)$ e $(t_1, -\infty)$. Dessa forma, temos que:

$$\begin{aligned} \int_{C_1} d\tau A(t_1, \tau) B^<(\tau, t_{1'}) &= \int_{-\infty}^{t_1} dt A^>(t_1, t) B^<(t, t_{1'}) + \int_{t_1}^{-\infty} dt A^<(t_1, t) B^<(t, t_{1'}) \\ &= \int_{-\infty}^{t_1} dt A^>(t_1, t) B^<(t, t_{1'}) - \int_{-\infty}^{t_1} dt A^<(t_1, t) B^<(t, t_{1'}) \\ &= \int_{-\infty}^{t_1} dt [A^>(t_1, t) - A^<(t_1, t)] B^<(t, t_{1'}) \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dt \theta(t_1 - t) [A^>(t_1, t) - A^<(t_1, t)] B^<(t, t_{1'}) \\ &\equiv \int_{-\infty}^{\infty} dt A^r(t_1, t) B^<(t, t_{1'}). \end{aligned} \quad (3.24)$$

Assim, agora estamos fazendo a integração em um tempo t real. Note, no primeiro termo do lado direito da primeira igualdade, que como t é sempre menor que t_1 , temos

que $A(t_1, t) = A^>(t_1, t)$, enquanto que no segundo termo como t_1 também é maior que t , embora esteja no ramo de baixo definido por $(t_1, -\infty)$, usamos $A(t_1, t) = A^<(t_1, t)$. Dessa forma, eliminamos toda dependência em relação ao contorno de integração C_1 . Entretanto, devemos trabalhar agora com a função de Green retardada.

De forma análoga,

$$\begin{aligned}
 \int_{C_1'} d\tau A^<(t_1, \tau) B(\tau, t_{1'}) &= \int_{-\infty}^{t_{1'}} dt A^<(t_1, t) B^<(t, t_{1'}) + \int_{t_{1'}}^{-\infty} dt A^<(t_1, t) B^>(t, t_{1'}) \\
 &= \int_{-\infty}^{t_{1'}} dt A^<(t_1, t) B^<(t, t_{1'}) - \int_{-\infty}^{t_{1'}} dt A^<(t_1, t) B^>(t, t_{1'}) \\
 &= \int_{-\infty}^{t_{1'}} dt A^<(t_1, t) [B^<(t, t_{1'}) - B^>(t, t_{1'})] \\
 &= \int_{-\infty}^{\infty} dt \theta(t_{1'} - t) A^<(t_1, t) [B^<(t, t_{1'}) - B^>(t, t_{1'})] \\
 &= \int_{-\infty}^{\infty} dt A^<(t_1, t) B^a(t, t_{1'})
 \end{aligned} \tag{3.25}$$

Portanto, $C^<(t_1, t_{1'})$ pode ser obtido através de uma integração no tempo real t de $-\infty$ à ∞ pela equação:

$$C^<(t_1, t_{1'}) = \int_{-\infty}^{\infty} dt [A^r(t_1, t) B^<(t, t_{1'}) + A^<(t_1, t) B^a(t, t_{1'})]. \tag{3.26}$$

Podemos calcular $C^>$, basta fazer a reposição $<\rightarrow>$. Além disso, para um produto de funções do tipo $D = ABC$, temos:

$$D^< = A^r B^r C^< + A^r B^< C^a + A^< B^a C^a, \tag{3.27}$$

onde estamos omitindo as integrais e os índices. Essa equação também é válida para o $D^>$, basta trocar $<$ por $>$.

De forma semelhante, podemos obter uma expressão simples para C^r , a função de Green retardada:

$$\begin{aligned}
 C^r(t_1, t_{1'}) &= \theta(t_1, t_{1'}) [C^>(t_1, t_{1'}) - C^<(t_1, t_{1'})] \\
 &= \theta(t_1 - t_{1'}) \int_{-\infty}^{\infty} dt [A^r(B^> - B^<) + (A^> - A^<) B^a] \\
 &= \theta(t_1 - t_{1'}) \left[\int_{-\infty}^{t_1} dt (A^> - A^<)(B^> - B^<) + \int_{-\infty}^{t_{1'}} dt (A^> - A^<)(B^< - B^>) \right] \\
 &= \theta(t_1 - t_{1'}) \left[\int_{-\infty}^{t_1} dt (A^> - A^<)(B^> - B^<) + \int_{t_{1'}}^{-\infty} dt (A^> - A^<)(B^> - B^<) \right] \\
 &= \theta(t_1 - t_{1'}) \left[\int_{t_{1'}}^{t_1} dt (A^> - A^<)(B^> - B^<) \right] \\
 &= \int_{t_{1'}}^{t_1} dt \theta(t_1 - t) (A^> - A^<) \theta(t - t_{1'}) (B^> - B^<) \\
 &= \int_{t_{1'}}^{t_1} dt A^r(t_1, t) B^r(t, t_{1'}).
 \end{aligned} \tag{3.28}$$

Pode acontecer também de encontrarmos termos na série perturbativa onde dois, ou mais, propagadores começam e terminam nos mesmos pontos, dizemos que tais propagadores são paralelos; há também os antiparalelos, nos quais o ponto de partida de um propagador é o ponto terminal do outro, e vice-versa. Nesses casos, temos uma estrutura algébrica da seguinte forma:

$$\begin{aligned} C(\tau, \tau') &= A(\tau, \tau')B(\tau, \tau') \\ D(\tau, \tau') &= A(\tau, \tau')B(\tau', \tau), \end{aligned} \quad (3.29)$$

onde τ e τ' são variáveis do contorno.

Nesse caso, obtemos para propagadores paralelos:

$$\begin{aligned} C^<(t, t') &= A^<(t, t')B^<(t, t') \\ C^r(t, t') &= A^<(t, t')B^r(t, t') + A^r(t, t')B^<(t, t') + A^r(t, t')B^r(t, t'), \end{aligned} \quad (3.30)$$

e para propagadores antiparalelos:

$$\begin{aligned} D^<(t, t') &= A^<(t, t')B^>(t', t) \\ D^r(t, t') &= A^<(t, t')B^a(t, t') + A^r(t, t')B^<(t, t'). \end{aligned} \quad (3.31)$$

Essas equações são conhecidas como equações de Langreth e serão importantes quando estudarmos o transporte de elétrons em um regime de não-equilíbrio em um ponto quântico.

3.4 Equação de Keldysh

Com o método de continuação analítica, podemos obter as chamadas equações de movimento para as funções de Green de não-equilíbrio. Vamos focar aqui na formulação de Keldysh, a qual fornece uma equação de movimento integral para a função de Green menor $G^<$, ou também conhecida como função de correlação.

Substituindo a Equação (3.27) na Equação de Dyson, obtemos a seguinte expressão:

$$G^< = G_0^< + G_0^r \Sigma^r G^< + G_0^r \Sigma^< G^a + G_0^< \Sigma^a G^a, \quad (3.32)$$

Fazendo algumas iterações, mostradas no Apêndice B, obtemos:

$$G^< = [1 + G^r \Sigma^r] G_0^< [1 + \Sigma^a G^a] + G^r \Sigma^< G^a \quad (3.33)$$

Essa equação é conhecida como equação integral de Keldysh. Para estados no qual o sistema é inicialmente não interagente no passado remoto, pode-se mostrar que o primeiro termo é nulo (JAUHO, 2006). Portanto, em muitas aplicações só basta considerar o segundo termo. É importante também mencionarmos de que, embora essa equação tenha uma forma simples, a self-energy $\Sigma^<$ é um funcional de $G^<$.

4 Pontos Quânticos Caóticos

4.1 Descrição do ponto quântico caótico

Em um fenômeno de espalhamento, temos uma pequena região de confinamento chamada de região de interação. Essa região é o nosso ponto quântico, mostrado na Figura 15, que é conectada a regiões de condução de elétrons chamadas de terminais. A interface entre uma região de interação e de terminais é chamada de pontos de contatos. Em mecânica quântica, confinamento gera quantização de energia; portanto, haverá níveis de energias permitidos para o transporte eletrônico através da região de interação. Estes níveis de energia são chamados de ressonâncias. Sobre os terminais, a condução dos elétrons será determinada pelas dimensões do fio (terminal). Em geral, os terminais são muito finos e por isso haverá quantizações nos níveis de energia. As quantizações nos níveis de energia nos terminais são chamados de modos propagantes. Os modos propagantes são formados em

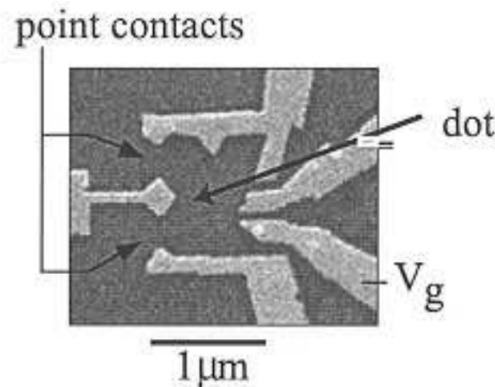


Figura 15 – Micrografia eletrônica de um ponto quântico, a região escura é a interface de uma estrutura heterogênea formada por GaAs/AlGaAs, onde é formado um gás de elétrons bi-dimensional. Potenciais eletrostáticos são aplicados nas portas metálicas, representada pela região clara. Podemos mudar a forma do ponto quântico aplicando diferentes voltagens, representada por V_g . Os elétrons passam pelos pontos de contato e assim são ricocheteados nas paredes do ponto quântico. Figura retirada (FOLK et al., 1996).

um terminal semi-infinito devido a sua pequena largura d em relação a região de interação, representado pela Figura 16. Nos terminais, haverá um conjunto de estados denotados por $|n, E\rangle$, onde n pode ser um índice de sub-rede, spin e etc, indexados por $n = 1, \dots, M$ e E representa a energia do estado. Assim, temos a condição de ortogonalidade,

$$\langle n, E_1 | m, E_2 \rangle = \delta_{mn} \delta(E_1 - E_2), \quad (4.1)$$

que indica que os estados são independentes, chamaremos esses estados independentes de canais abertos. Além disso, na região de interação, assumimos um conjunto discreto $|\mu\rangle$,

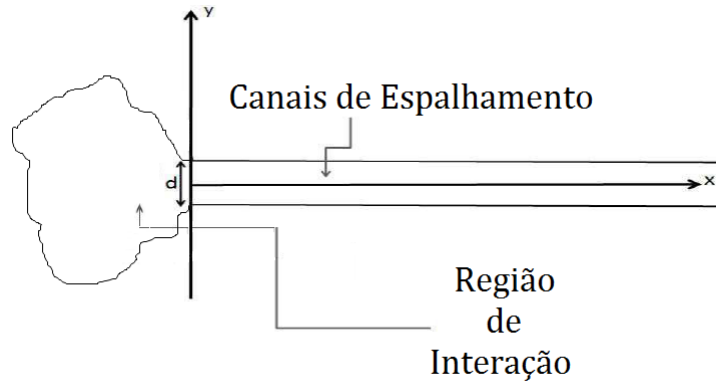


Figura 16 – Representação de um acoplamento entre o ponto quântico e um terminal. Figura retirada de (RAMOS, 2010).

onde $\mu = 1, \dots, N_c$ que representa as ressonâncias.

Inicialmente, podemos escrever o hamiltoniano do sistema sem acoplamento da seguinte forma:

$$H_0 = \sum_{\mu\nu} (H_{ri})_{\mu\nu} |\mu\rangle \langle \nu| + \sum_n \int dE |n, E\rangle E \langle n, E|, \quad (4.2)$$

onde o primeiro termo representa a energia dos estados ressonantes na região de interação e o segundo termo representa os canais abertos nos terminais.

O termo de acoplamento pode ser escrito como:

$$V = \sum_{\mu\nu} \left(|\mu\rangle \int dE W_{\mu n} \langle n, E| + \text{h.c} \right). \quad (4.3)$$

Assim, o hamiltoniano completo fica $H = H_0 + V$. Como estamos tratando o problema no espaço de Hilbert $\mathcal{H}$, o produto interno é bem definido e o espaço é normado. Além disso, o operador hamiltoniano atua $H : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ tal que:

$$\langle H\Phi^{(1)} | \Phi^{(2)} \rangle = \langle \Phi^{(1)} | H^\dagger \Phi^{(2)} \rangle, \quad \forall \Phi^{(1)}, \Phi^{(2)} \in \mathcal{H}, \quad (4.4)$$

onde $H^\dagger$ é o operador adjunto. O termo $W_{\mu n}$ representa o ponto de contato que permite o acoplamento do terminal com o ponto quântico. É possível controlar este acoplamento de acordo com a voltagem aplicada para o fluxo de elétrons e com a largura L e a abertura A na Figura 17.

Antes de passar pelo ponto de contato, a dinâmica do elétron é descrita pela equação de Schrödinger:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) \psi(x, y) = \frac{(\hbar k)^2}{2m} \psi(x, y), \quad (4.5)$$

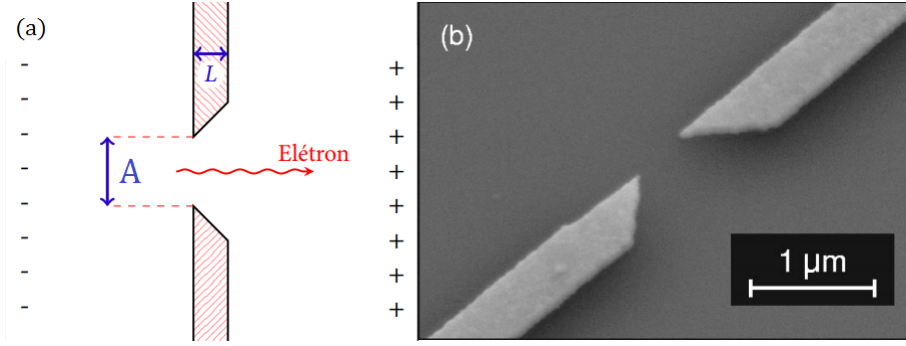


Figura 17 – (a) Representação de um ponto de contato (SANTOS et al., 2015). (b) Ponto de contato obtido por micrografia (OBERHOLZER et al., 2002)

onde m é a massa do elétron e $\hbar k$ é o seu momento. Seguindo a construção da Figura 16, os estados $\psi(x, y)$ são quantizados na direção y e são livres na direção x , ou seja, $\psi(x, y = \pm d/2) = 0$.

A solução normalizada que representa os modos propagantes é dada por:

$$\psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar^2 k_n/m}} [A_n e^{-ik_n x} + B_n e^{ik_n x}], \quad (4.6)$$

enquanto que a solução na direção y fica:

$$\phi_n(y) = \sqrt{\frac{2}{d}} \sin \left[\left(\frac{n\pi}{d} \right) \left(y + \frac{d}{2} \right) \right], \quad n = 1, \dots, M. \quad (4.7)$$

Assim, a solução geral $\Psi(x, y) = \psi(x)\phi(y)$ e a energia total é constituída por:

$$\frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m} + \frac{\hbar^2 k_y^2}{2m}, \quad (4.8)$$

mas como $k_y = (n\pi/d)$, temos:

$$k_{xn} = \left[k^2 - \left(\frac{n\pi}{d} \right)^2 \right]^{1/2}. \quad (4.9)$$

Para descrever um fenômeno de transporte eletrônico, é necessário que k_{xn} seja real. Desta forma, como o valor máximo de n é M , temos que:

$$\frac{kd}{\pi} \geq M, \quad (4.10)$$

isto é, a quantidade de canais abertos está relacionada, por uma desigualdade, com o produto do número de onda do elétron incidente k e a largura d do terminal. Assim, é possível saber, ajustando k e d , a quantidade de canais em um determinado terminal.

Olhando agora para a região de interação, comentamos que há N_c estados ortogonais na cavidade. Com isso, vamos agrupar as amplitudes de probabilidades na forma $u = (u_1, u_2, \dots, u_{N_c})^T$ do sistema ser encontrado em uma das ressonâncias. Considerando o

acoplamento entre a região de interação e o terminal, realizamos um procedimento chamado extensão auto-adjunta do espaço de Hilbert que consiste em incorporar as amplitudes de probabilidade da região de interação (u) e dos terminais (Ψ) em um único estado escrito por:

$$\Phi = (u, \Psi)^T. \quad (4.11)$$

Desta forma, o operador hamiltoniano fica:

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} \hat{H}_{ri} & \hat{W}^{(1)} \\ \hat{W}^{(2)} & \hat{H}_c \end{pmatrix}, \quad (4.12)$$

onde $\hat{H}_{ri}$ representa o hamiltoniano na região de interação (cavidade caótica), enquanto que $\hat{H}_c$ representa o hamiltoniano nos terminais e é dado por:

$$\hat{H}_c = -\frac{\hbar^2}{2m} \text{diag} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}, \dots, \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) \quad (4.13)$$

e os $\hat{W}$'s representam os pontos de contato. Admitindo que o acoplamento é local, podemos escolher $\hat{W}^{(2)} = 0$ e $\hat{W}^{(1)}$ da seguinte forma:

$$\hat{W}^{(1)}\Psi = \int_{-d/2}^{d/2} dy W(y) \Psi(0, y) = \hat{\omega} \psi(0), \quad (4.14)$$

onde $\Psi(0, y) = \phi_n(y) \psi(0)$ e as entradas de $\hat{\omega}$ são:

$$\omega_{\mu n} = \int_{-d/2}^{d/2} dy W_{\mu n}(y) \phi_n(y). \quad (4.15)$$

Assim, o hamiltoniano $\hat{H}$ atua sobre o estado Φ no espaço de Hilbert estendido da seguinte forma:

$$\hat{H}\Phi = (\hat{H}_{ri}u + \hat{\omega}\psi(0), \hat{H}_c\Psi)^T. \quad (4.16)$$

O produto interno é definido por:

$$\langle \Phi_1 | \Phi_2 \rangle = u_1^\dagger u_2 + \langle \Psi_1 | \Psi_2 \rangle, \text{ onde } \langle \Psi_1 | \Psi_2 \rangle = \int_{-d/2}^{d/2} dy \int_0^\infty dx \Psi_1^\dagger \Psi_2. \quad (4.17)$$

Até aqui, vimos o caso em que o hamiltoniano é geral, porém estamos interessados no caso em que o hamiltoniano $\hat{H}$ seja hermitiano. Admitindo que $\hat{H}_{ri}$ já é hermitiano, temos que:

$$\langle \hat{H}\Phi_1 | \Phi_2 \rangle - \langle \Phi_1 | \hat{H}\Phi_2 \rangle = \psi_1^\dagger(0) \hat{\omega}^\dagger u_2 + \langle \hat{H}_c \Psi_1 | \Psi_2 \rangle - u_1^\dagger \hat{\omega} \psi_2(0) - \langle \Psi_1 | \hat{H}_c \Psi_2 \rangle. \quad (4.18)$$

Considerando que as funções de onda $\Psi_{1,2}$ tendem a zero no infinito devido a parte $\psi(x)$ e as condições de vínculos em $y = \pm d/2$, temos:

$$\langle \hat{H}\Phi_1 | \Phi_2 \rangle - \langle \Phi_1 | \hat{H}\Phi_2 \rangle = \psi_1^\dagger(0) \hat{\omega}^\dagger u_2 + \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial \psi_1^\dagger}{\partial x} \right) \Big|_{x=0} \psi_2(0) - u_1^\dagger \hat{\omega} \psi_2(0) - \frac{\hbar^2}{2m} \psi_1^\dagger(0) \left(\frac{\partial \psi_2}{\partial x} \right) \Big|_{x=0}. \quad (4.19)$$

Por imposição, vamos considerar que o hamiltoniano geral $\hat{H}$ deve ser hermitiano. Esta imposição implica na condição de contorno:

$$\hat{\omega}^\dagger u = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial \psi}{\partial x} \right) \Big|_{x=0}. \quad (4.20)$$

Agora, com $\hat{H}$ hermitiano, esperamos que satisfaça a equação de auto-valores:

$$\hat{H}\Phi = (\hat{H}_{ri}u + \hat{\omega}\psi(0), \hat{H}_c\Psi)^T = E(u, \Psi)^T, \quad (4.21)$$

ou seja, a primeira componente nos fornece:

$$u = (E - \hat{H}_{ri})^{-1} \hat{\omega}\psi(0). \quad (4.22)$$

Substituindo a Equação 4.22 na Equação 4.20, temos:

$$\hat{\omega}^\dagger (E - \hat{H}_{ri})^{-1} \hat{\omega}\psi(0) = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial \psi}{\partial x} \right) \Big|_{x=0}. \quad (4.23)$$

Substituindo $\psi(x)$ dado na Equação 4.6 na equação acima e definindo:

$$\hat{W} = \sqrt{\frac{2m}{\pi\hbar^2}} \hat{\omega} k^{-1/2}, \quad (4.24)$$

onde k é definido por $k \equiv \text{diag}(k_1, k_2, \dots, k_M)$, podemos expressar os coeficientes B 's em termos dos A 's da equação 4.6 da seguinte forma:

$$B = \frac{\mathbb{1} - i\pi \hat{W}^\dagger (E - \hat{H}_{ri})^{-1} \hat{W}}{\mathbb{1} + i\pi \hat{W}^\dagger (E - \hat{H}_{ri})^{-1} \hat{W}} A, \quad (4.25)$$

obtendo a matriz de espalhamento S da relação $B = SA$. A matriz S pode ser escrita na forma $S = (\mathbb{1} - iF)(\mathbb{1} + iF)^{-1}$, onde $F = \pi \hat{W}^\dagger (E - \hat{H}_{ri})^{-1} \hat{W}$, e pelo apêndice A obtemos a matriz de espalhamento na forma

$$S = \mathbb{1} - 2i\pi \hat{W}^\dagger \frac{1}{E - \hat{H}_{ri} + i\pi \hat{W} \hat{W}^\dagger} \hat{W}. \quad (4.26)$$

Esta equação é conhecida como fórmula de Mahaux-Weidenmuller. Como falamos, o operador $\hat{H}_{ri}$ é o hamiltoniano da região de interação. Nosso objetivo é estudar uma região de interação caótica, isso significa que em cada espalhamento de elétrons as configurações da região de interação, como bordas e níveis de energia, serão diferentes. Dessa forma, implementamos o caos nesse sistema considerando um ensemble de matrizes aleatórias que modelam nossa cavidade caótica, onde todas essas matrizes aleatórias possuem a mesma quantidade de ressonâncias. Já o operador $\hat{W}$ representa o acoplamento entre um canal propagante com uma ressonância, que satisfaz o vínculo (FYODOROV; SOMMERS, 1997):

$$\hat{W}_l^\dagger \hat{W}_{l'} = \frac{N_c \Delta}{\pi^2} \hat{\omega}_{ll'} \delta_{ll'}, \quad (4.27)$$

onde N_c e Δ representam o número de ressonâncias e a distância média entre as ressonâncias, respectivamente. Em (ALMEIDA, 2010) há uma forma funcional do operador $\hat{W}$ que satisfaz a condição da Equação 4.27. Este operador $\hat{W}$ é dado por:

$$(W_\mu)_{jk} = e^{-\alpha_j/2} \sqrt{\frac{2\lambda}{\pi(N_c + 1)}} \sin \left[\frac{j(N_1\delta_{\mu 2} + k)\pi}{N_c + 1} \right], \quad (4.28)$$

onde $\alpha_{\mu,j} = -\ln(\omega_{\mu,j})$ e $\omega_{\mu,j}$ é dado pela Equação 4.15. A justificativa da condição dada pela Equação 4.27 é que não é permitido processos diretos, isto é, processos nos quais os elétrons passam de um guia para o outro sem passar pela cavidade caótica. É necessário que se forme um estado ressonante intermediário, e esse estado é formado justamente na cavidade caótica.

Voltando para a função de Green, se olharmos o primeiro termo da Equação 2.24, temos a descrição do propagador causal de uma partícula livre. No contexto de pontos quânticos, o propagador na forma de operador é obtido de forma análoga (RYNDYK et al., 2016):

$$\hat{G}^R(E) = [(E + i\eta)\mathbb{1} - \hat{H}]^{-1}. \quad (4.29)$$

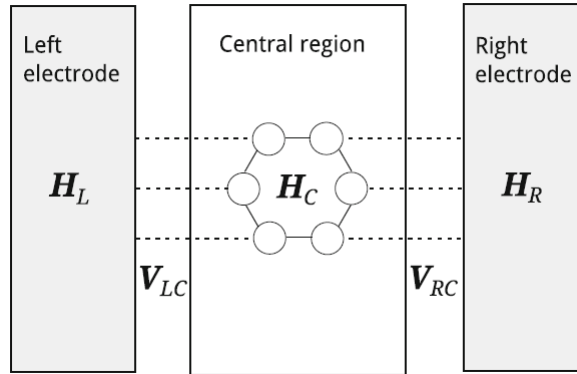


Figura 18 – Ponto quântico acoplado a dois eletrodos (terminais). (RYNDYK et al., 2016)

Quando estudamos um sistema com dois guias, como na Figura 18, o hamiltoniano é escrito na forma:

$$H = \begin{pmatrix} H_L & V_{LC} & 0 \\ V_{CL} & H_C & V_{CR} \\ 0 & V_{RC} & H_R \end{pmatrix}, \quad \begin{cases} V_{CR} = V_{RC}^\dagger, \\ V_{CL} = V_{LC}^\dagger \end{cases} \quad (4.30)$$

onde H_L, H_R, H_C são os hamiltonianos do guia esquerdo, direito e da região central, respectivamente; enquanto que os V 's representam as interações entre regiões distintas. Note que os termos V_{LR} e V_{RL} são identicamente nulos pois não há reações diretas. Prosseguindo, escrevemos a Equação 4.29 na forma:

$$[(E + i\eta)\mathbb{1} - \hat{H}]\hat{G}^R = \mathbb{1}. \quad (4.31)$$

Esta equação pode ser escrita como:

$$\begin{pmatrix} E - H_L & -V_{LC} & 0 \\ -V_{LC}^\dagger & E - H_C & -V_{RC}^\dagger \\ 0 & -V_{RC} & E - H_R \end{pmatrix} \begin{pmatrix} G_L & G_{LC} & 0 \\ G_{CL} & G_C & G_{CR} \\ 0 & G_{RC} & G_R \end{pmatrix} = \mathbb{1}, \quad (4.32)$$

onde $E = E + i\eta$ para simplificar. Note novamente que G_{RL} e G_{LR} são nulos pois não há reações diretas. Assim, fazendo a multiplicação de matrizes obtemos:

$$\begin{aligned} (E - H_L)G_{LC} - V_{LC}G_C &= 0 \\ -V_{LC}^\dagger G_{LC} + (E - H_C)G_C - V_{RC}^\dagger G_{RC} &= \mathbb{1} \\ -V_{RC}G_C + (E - H_R)G_{RC} &= 0 \end{aligned} \quad (4.33)$$

Da primeira e terceira equação podemos obter:

$$\begin{aligned} G_{LC} &= (E - H_L)^{-1}V_{LC}G_C, \\ G_{RC} &= (E - H_R)^{-1}V_{RC}G_C, \end{aligned} \quad (4.34)$$

e substituindo na segunda Equação do conjunto de Equações 4.33, temos:

$$(E - H_C - \Sigma)G_C = \mathbb{1}, \quad (4.35)$$

onde introduzimos a auto-energia (*self-energy*) do eletrodo Σ , dado por:

$$\Sigma = V_{LC}^\dagger(E - H_L)^{-1}V_{LC} + V_{RC}^\dagger(E - H_R)^{-1}V_{RC}. \quad (4.36)$$

Finalmente, a função de Green retardada da região de interação (central) é dada por:

$$G_C^R = \frac{1}{E - H_C - \Sigma^R} \quad (4.37)$$

Note a semelhança da Equação 4.37 com o segundo termo da matriz de espalhamento S da Equação 4.26. Assim, podemos identificar que:

$$S = \mathbb{1} - 2i\pi\hat{W}^\dagger G_C^R \hat{W}. \quad (4.38)$$

O efeito do acoplamento entre o terminal e o ponto quântico está incluído na auto-energia. Para obtermos a função de Green avançada só basta tomar o conjugado hermitiano $G_C^A = G_C^{R\dagger}$. De forma análoga, a auto-energia avançada é obtida tomando o complexo conjugado $\Sigma^A = \Sigma^{R\dagger}$. Assim, a auto-energia retardada pode ser identificada comparando a Equação 4.38 com a Equação 4.26:

$$\Sigma^R = -i\pi\hat{W}\hat{W}^\dagger. \quad (4.39)$$

4.2 Teoria de Matrizes Aleatórias

A teoria de matrizes aleatórias se mostra satisfatória na descrição de fenômenos de sistemas complexos, como teoria de muitos corpos, onde há um interesse de estudar átomos e moléculas complexas. (WIGNER, 1955) introduziu o conceito de matrizes aleatórias para explicar as constantes mudanças nas auto-energias de um núcleo atômico pesado, onde tais ressonâncias revelavam-se por meio de picos na seção de choque de forma aleatória. Em sua abordagem, Wigner considerou um ensemble governado por diferentes hamiltonianos com alguma propriedade de simetria em comum. Esta abordagem dá ênfase nas propriedades genéricas comuns a todos os elementos do ensemble. Este postulado garante que não há base preferencial no espaço de Hilbert pois como os hamiltonianos são aleatórios, consequentemente, os auto-estados também serão.

Influenciado por Wigner, (DYSON, 1970) mostrou que há três ensembles genéricos de matrizes aleatórias, definidas em termos de propriedades de simetria do hamiltoniano. Chamamos esse grupo de ensemble gaussiano de Wigner-Dyson, que é constituído por:

(i) Ensemble Gaussiano Ortogonal ($\beta = 1$): Sistemas invariantes por reversão temporal com simetria de rotação de spin semi-inteiro. Para tais sistemas, a matriz hamiltoniana deve ser real e simétrica:

$$H_{mn} = H_{nm} = H_{mn}^*. \quad (4.40)$$

O índice $\beta = 1$ representa que há apenas um grau de liberdade independente por entrada.

(ii) Ensemble Gaussiano Unitário ($\beta = 2$): Sistemas em que a invariância de reversão temporal é violada. Um dos exemplos mais importantes desse caso é um elétron inserido em um campo magnético externo fixo suficientemente forte. Para tais sistemas, a matriz hamiltoniana é hermitiana:

$$H_{mn} = [H^\dagger]_{nm}. \quad (4.41)$$

(iii) Ensemble Gaussiano Simplético ($\beta = 4$): Sistemas invariantes por reversão temporal e com simetria de rotação de spin semi-inteiro quebrada. O hamiltoniano pode ser escrito em termos de quatérnion, ou seja, em termos das matrizes de Pauli, na forma:

$$H_{nm}^{(0)} 1_2 - i \sum_{\gamma=1}^3 H_{nm}^{(\gamma)} \sigma_\gamma, \quad (4.42)$$

onde $\gamma = 1, 2, 3$. Todas as $H^{(\gamma)}$ para $\gamma = 0, \dots, 3$ são reais, porém $H^{(0)}$ é simétrico, enquanto que $H^{(\gamma)}$ com $\gamma = 1, 2, 3$ são anti-simétricos.

Em todos os três casos, a probabilidade de encontrar uma matriz particular é proporcional a um peso $P_{N_c, \beta}(H)$, onde N_c representa a quantidade de ressonâncias. As

propriedades de simetrias dadas pelas Equações (4.40), (4.41) e (4.42), e as funções pesos $P_{N_c\beta}(H)$ para $\beta = 1, 2, 4$ são invariantes sob transformações ortogonais, unitárias e simpléticas do hamiltoniano, respectivamente. Wigner considerou as funções pesos $P_{N\beta}$ na forma:

$$P_{N_c\beta}(H) \propto \exp\left(-\frac{\beta}{4\mathcal{V}} \text{Tr } H^2\right), \quad (4.43)$$

onde $\mathcal{V}$ está relacionado com a variância da distribuição. A Equação 4.43 é uma distribuição Gaussiana, caracterizando este ensemble como Ensemble Gaussiano de Wigner-Dyson. $P_{N_c\beta}(H)$ carrega uma facilidade na implementação pois $\text{Tr } H^2 = \text{Tr } HH^\dagger = \sum_{\mu\nu} |H_{\mu\nu}|^2$, mostrando que cada contribuição é independente. Desta forma, como os elementos do hamiltoniano são variáveis aleatórias independentes, podemos fatorar a distribuição, tornando mais simples os cálculos. A escolha do ensemble gaussiano de matrizes hamiltonianas é satisfatória para tratar sistemas nos quais o número de ressonâncias é muito grande ($N_c \rightarrow \infty$) pois as ressonâncias são independentes, enquanto que as entradas da matriz hamiltoniana são independentes.

Usaremos o Ensemble Gaussiano para descrever o hamiltoniano de um ponto quântico caótico. Em cada realização, isto é, em cada configuração específica das voltagens V_g nas portas metálicas na Figura 15, é possível atribuir um hamiltoniano H , cujos elementos são sorteados por uma distribuição gaussiana, que será utilizado para calcular a função de Green 4.29. Para descrever um ponto quântico caótico, é necessário que o número de ressonâncias seja maior que o número de canais abertos nos terminais $N_c \gg M$.

5 Implementação do Formalismo de Keldysh em Problemas de Espalhamento Eletrônico em Pontos Quânticos

5.1 Descrição do Transporte de Não-Equilíbrio em Pontos Quânticos

No capítulo anterior, vimos a construção teórica da descrição do espalhamento em um ponto quântico caótico no regime de equilíbrio, onde o acoplamento entre o guia e a cavidade é dada por contatos sem estruturas, para voltagens pequenas e numa situação em que o ponto quântico é modelado por uma sistema não interagente e independente do tempo. Nosso objeto agora é estudar sistemas mesoscópicos utilizando teoria de perturbação de não-equilíbrio. O objetivo é estender o estudo do espalhamento eletrônico para situações em que interações, dependências temporais e propriedades físicas como supercondutividade e magnetismos são importantes. A diferença básica entre a construção de equilíbrio e não-equilíbrio é que, na última, não podemos assumir que o sistema retorne ao seu estado fundamental quando $t \rightarrow \infty$. Em problemas de não-equilíbrio, podemos contornar este fato assumindo que o sistema evolui de $t = -\infty$ até um tempo relevante para a descrição do sistema, que chamaremos de $t = t_0$; após isso, o sistema evolui do tempo $t = t_0$ de volta ao tempo $t = -\infty$. Este contorno é conhecido como o contorno de Keldysh-Schwinger mostrado na Figura 11. A vantagem deste procedimento é que a função de Green e valores esperados de observáveis serão definidos em relação a um estado bem definido, que é o estado inicial $|\phi_0\rangle$ ou $\hat{\rho}_0$. Entretanto, o preço que devemos pagar é tratar os dois ramos do contorno de igual para igual, requerendo que as variáveis temporais sejam descritas no plano complexo. Assim, para evitar a descrição do tempo no plano complexo, usamos a técnica de continuação analítica. Desta forma, a ideia do contorno nos induz a trabalhar com as funções de Green G_c , $G_{\bar{c}}$, G^a , G^r , $G^>$ e $G^<$; todas elas descritas em relação a parâmetros reais que constituem o tempo físico.

No caso do tunelamento eletrônico em pontos quânticos, inicialmente, vamos considerar que os guias e a região de interação estão desacoplados e vamos permitir também que os guias estejam em equilíbrio térmico. O fato dos guias estarem desacoplados com a região de interação é uma justificativa para tratarmos o acoplamento entre eles de forma perturbativa. O acoplamento entre regiões diferentes é tratado como perturbações semelhantes às técnicas padrões da teoria de perturbação.

Vamos separar o hamiltoniano em três partes

$$\hat{H} = \hat{H}_c + \hat{H}_T + \hat{H}_{cen}, \quad (5.1)$$

onde $\hat{H}_c$, $\hat{H}_T$ e $\hat{H}_{cen}$ descrevem os terminais, acoplamento de tunelamento entre os terminais e a região de interação e a região de interação (central), respectivamente.

Os elétrons nos terminais são considerados como não-interagentes. Assim, o hamiltoniano é dado por

$$\hat{H}_c = \sum_{\mathbf{k}, \alpha \in L, R} \epsilon_{\mathbf{k}\alpha} c_{\mathbf{k}\alpha}^\dagger c_{\mathbf{k}\alpha}, \quad (5.2)$$

onde o índice α representa os graus de liberdades em um determinado guia, como spin, sub-rede e etc; enquanto que ϵ_α é a energia de um determinado canal no guia. As funções de Green nos guias para um sistema desacoplado são

$$\begin{aligned} g_{\mathbf{k}\alpha}^<(t-t') &= i \langle c_{\mathbf{k}\alpha}^\dagger(t') c_{\mathbf{k}\alpha}(t) \rangle = i f(\epsilon_{\mathbf{k}\alpha}) e^{-i\epsilon_{\mathbf{k}\alpha}(t-t')} \\ g_{\mathbf{k}\alpha}^{r,a}(t-t') &= \mp i \theta(\pm t \mp t') \langle \{ c_{\mathbf{k}\alpha}(t), c_{\mathbf{k}\alpha}^\dagger(t') \} \rangle \\ &= \mp i \theta(\pm t \mp t') e^{-i\epsilon_{\mathbf{k}\alpha}(t-t')}, \end{aligned} \quad (5.3)$$

onde $f(\epsilon_{\mathbf{k}\alpha}) = [\exp(\frac{\epsilon_{\mathbf{k}\alpha} - \mu}{k_B T}) + 1]^{-1}$ é a distribuição de Fermi-Dirac em um determinado terminal.

O hamiltoniano que representa a interação entre um determinado terminal e a região central é dado por:

$$\hat{H}_T = \sum_{n, \mathbf{k}, \alpha \in L, R} [V_{\mathbf{k}\alpha, n} c_{\mathbf{k}\alpha}^\dagger d_n + h.c], \quad (5.4)$$

onde $d_n^\dagger$ e d_n são operadores de criação e aniquilação para o conjunto completo e ortogonal $|n\rangle$ na região central, o índice n representa uma ressonância arbitrária da região central.

Sobre o hamiltoniano na região central, H_{cen} , é necessário saber sua geometria pois ela determinará a forma do hamiltoniano. Para a região central consistindo de níveis de energia não-interagentes, o hamiltoniano é descrito por

$$\hat{H}_{cen} = \sum_m \epsilon_m d_m^\dagger d_m, \quad (5.5)$$

onde ϵ_m representa as energias da região de interação. Como já falamos, não há interação entre os níveis de energia na região de interação, isto é, dado que um elétron entra em uma ressonância, a probabilidade de ele passar pra outra é nula, fato que pode ser visto pela ausência de termos cruzados no hamiltoniano. O elétron pode passar pra outra ressonância caso seja adicionado um campo externo; matematicamente, esse campo externo poderia ser adicionado escrevendo termos cruzados no hamiltoniano. Outros exemplos de hamiltonianos podem ser vistos, como o caso de tunelamento ressonante com interação elétron-fônons, interação coulombiana e etc. Estes últimos casos não serão tratados nessa dissertação.

5.2 Fórmula de Meir-Wingreen

(MEIR; WINGREEN, 1992) investigaram a fórmula de Landauer para a corrente através de uma região de interação. Eles buscaram descrever a corrente que flui do guia esquerdo através da barreira à região central, que pode ser calculada usando a evolução temporal do operador número de ocupação do terminal esquerdo

$$J_L = -e \langle \dot{N}_L \rangle = -\frac{ie}{\hbar} \langle [\hat{H}, \hat{N}_L] \rangle, \quad (5.6)$$

onde usamos a Equação de Heisenberg. Sabendo que $N_L = \sum_{\mathbf{k}, \alpha \in L} c_{\mathbf{k}\alpha}^\dagger c_{\mathbf{k}\alpha}$, $\hat{H} = \hat{H}_c + \hat{H}_T + \hat{H}_{cen}$ e que $\hat{H}_c$ e $\hat{H}_{cen}$ comutam com N_L , temos

$$J_L = -\frac{ie}{\hbar} \langle [\hat{H}_T, \hat{N}_L] \rangle = \frac{ie}{\hbar} \sum_{n, \mathbf{k}, \alpha \in L, R} [V_{\mathbf{k}\alpha, n} \langle c_{\mathbf{k}\alpha}^\dagger d_n \rangle - V_{\mathbf{k}\alpha, n}^* \langle d_n^\dagger c_{\mathbf{k}\alpha} \rangle]. \quad (5.7)$$

Definindo agora as duas funções de Green por

$$\begin{aligned} G_{n, \mathbf{k}\alpha}^<(t - t') &\equiv i \langle c_{\mathbf{k}\alpha}^\dagger(t') d_n(t) \rangle \\ G_{\mathbf{k}\alpha, n}^<(t - t') &\equiv i \langle d_n^\dagger(t') c_{\mathbf{k}\alpha}(t) \rangle. \end{aligned} \quad (5.8)$$

Assim, quando $t = t'$, temos a propriedade da função de Green menor $G_{\mathbf{k}\alpha, n}^<(t, t)$

$$G_{\mathbf{k}\alpha, n}^<(t, t) = -[G_{n, \mathbf{k}\alpha}^<(t, t)]^*. \quad (5.9)$$

Desta forma, substituindo as definições da função de Green (Eq. 5.8) e usando a propriedade da Equação 5.9 na corrente 5.7, obtemos:

$$\begin{aligned} J_L &= \frac{ie}{\hbar} \sum_{\mathbf{k}, \alpha \in L; n} [V_{\mathbf{k}\alpha, n} (-i G_{n, \mathbf{k}\alpha}^<(t, t)) - V_{\mathbf{k}\alpha, n}^* (-i G_{\mathbf{k}\alpha, n}^<(t, t))] \\ &= \frac{ie}{\hbar} \sum_{\mathbf{k}, \alpha \in L; n} [-i V_{\mathbf{k}\alpha, n} G_{n, \mathbf{k}\alpha}^<(t, t) + i V_{\mathbf{k}\alpha, n}^* G_{\mathbf{k}\alpha, n}^<(t, t)] \\ &= \frac{e}{\hbar} \sum_{\mathbf{k}, \alpha \in L; n} [V_{\mathbf{k}\alpha, n} G_{n, \mathbf{k}\alpha}^<(t, t) + V_{\mathbf{k}\alpha, n}^* (G_{n, \mathbf{k}\alpha}^<(t, t))^*] \\ &= \frac{e}{\hbar} \sum_{\mathbf{k}, \alpha \in L; n} [V_{\mathbf{k}\alpha, n} G_{n, \mathbf{k}\alpha}^<(t, t) + (V_{\mathbf{k}\alpha, n} G_{n, \mathbf{k}\alpha}^<(t, t))^*] \\ &= \frac{2e}{\hbar} \sum_{\mathbf{k}, \alpha \in L; n} \text{Re}\{V_{\mathbf{k}\alpha, n} G_{n, \mathbf{k}\alpha}^<(t, t)\}. \end{aligned} \quad (5.10)$$

Portanto, a corrente fica:

$$J_L = \frac{2e}{\hbar} \text{Re} \left\{ \sum_{\mathbf{k}, \alpha \in L; n} V_{\mathbf{k}\alpha, n} G_{n, \mathbf{k}\alpha}^<(t, t) \right\} \quad (5.11)$$

Para calcularmos a corrente J_L , é necessário conhecermos $G_{n, \mathbf{k}\alpha}^<(t - t')$ que pode ser obtido por meio da técnica de equação de movimento. Para o regime de temperatura nula, basta aplicarmos $-i \frac{\partial}{\partial t}$ em $G_{n, \mathbf{k}\alpha}^t(t - t')$, obtendo:

$$-i \frac{\partial}{\partial t'} G_{n, \mathbf{k}\alpha}^t(t - t') = \epsilon_{\mathbf{k}} G_{n, \mathbf{k}\alpha}^t(t - t') + \sum_m G_{nm}^t(t - t') V_{\mathbf{k}\alpha, m}^*, \quad (5.12)$$

cujas deduções podem ser encontradas no Apêndice C. Assim, podemos escrever:

$$G_{n,\mathbf{k}\alpha}^t(t-t') \left(-i \frac{\partial^{\leftarrow}}{\partial t'} - \epsilon_{\mathbf{k}} \right) = \sum_m G_{nm}^t(t-t') V_{\mathbf{k}\alpha,m}^*, \quad (5.13)$$

onde $g_{\mathbf{k}\alpha}^{-1} = -i \frac{\partial^{\leftarrow}}{\partial t'} - \epsilon_{\mathbf{k}}$ pode ser visto como o inverso do operador função de Green para o terminal. Desta forma, multiplicando ambos os lados por $g_{\mathbf{k}\alpha}$, obtemos:

$$G_{n,\mathbf{k}\alpha}(t-t') = \sum_m \int dt_1 G_{nm}^t(t-t_1) V_{\mathbf{k}\alpha,m}^* g_{\mathbf{k}\alpha}^t(t_1-t'). \quad (5.14)$$

Aqui exploraremos a similaridade da teoria de equilíbrio e não-equilíbrio. Como tais teorias possuem a mesma estrutura matemática, temos no formalismo fora do equilíbrio:

$$G_{n,\mathbf{k}\alpha}(\tau, \tau') = \sum_m \int d\tau_1 G_{nm}(\tau, \tau_1) V_{\mathbf{k}\alpha,m}^* g_{\mathbf{k}\alpha}(\tau_1, \tau'), \quad (5.15)$$

onde a integral está especificada no contorno temporal do plano complexo. A regra de continuação analítica determina que:

$$G_{n,\mathbf{k}\alpha}^<(t-t') = \sum_m \int dt_1 V_{\mathbf{k}\alpha,m}^* [G_{nm}^r(t-t_1) g_{\mathbf{k}\alpha}^<(t_1-t') + G_{nm}^<(t-t_1) g_{\mathbf{k}\alpha}^a(t_1-t')], \quad (5.16)$$

onde a função de Green menor $g_{\mathbf{k}\alpha}^<$ é dada por:

$$\begin{aligned} g_{\mathbf{k}\alpha}^<(t-t') &= i \langle c_{\mathbf{k}\alpha}^\dagger(t') c_{\mathbf{k}\alpha}(t) \rangle \\ &= i f(\epsilon_{\mathbf{k}\alpha}^0) \exp \left[-i \epsilon_{\mathbf{k}\alpha}(t-t') \right], \end{aligned} \quad (5.17)$$

enquanto que a função de Green avançada $g_{\mathbf{k}\alpha}^a(t-t')$ é dada por:

$$\begin{aligned} g_{\mathbf{k}\alpha}^a(t-t') &= \mp i \theta(\pm t \mp t') \langle \{ c_{\mathbf{k}\alpha}(t), c_{\mathbf{k}\alpha}^\dagger(t') \} \rangle \\ &= \mp i \theta(\pm t \mp t') \exp \left\{ \left[-i \epsilon_{\mathbf{k}\alpha}(t-t') \right] \right\}. \end{aligned} \quad (5.18)$$

Como no nosso sistema físico há uma homogeneidade temporal, podemos de forma simples e eficiente calcular a corrente J_L através de uma transformação de Fourier. Desta forma, utilizando a transformada de Fourier, obtemos $G_{n,\mathbf{k}\alpha}^<(\epsilon)$ da seguinte forma:

$$G_{n,\mathbf{k}\alpha}^<(\epsilon) = \sum_m V_{\mathbf{k}\alpha,m}^* [G_{nm}^r(\epsilon) g_{\mathbf{k}\epsilon}^<(\epsilon) + G_{nm}^<(\epsilon) g_{\mathbf{k}\alpha}^a(\epsilon)]. \quad (5.19)$$

Substituindo na equação (5.11), temos:

$$J_L = \frac{2e}{\hbar} \int \frac{d\epsilon}{2\pi} \text{Re} \left\{ \sum_{\mathbf{k}, \alpha \in L; n, m} V_{\mathbf{k}\alpha,n} V_{\mathbf{k}\alpha,m}^* [G_{nm}^r(\epsilon) g_{\mathbf{k}\alpha}^<(\epsilon) + G_{nm}^<(\epsilon) g_{\mathbf{k}\alpha}^a(\epsilon)] \right\}. \quad (5.20)$$

Vamos agora definir a função de largura de nível:

$$\left[\Gamma^L(\epsilon_{\mathbf{k}}) \right]_{mn} = 2\pi \sum_{\alpha \in L} \rho_{\alpha}(\epsilon_{\mathbf{k}}) V_{\alpha,n}(\epsilon_{\mathbf{k}}) V_{\alpha,m}^*(\epsilon_{\mathbf{k}}) = 2\pi \sum_{\alpha \in L} W_{\alpha,n} W_{\alpha,m}^*, \quad (5.21)$$

onde $\rho_\alpha(\epsilon)$ é a densidade de estados. Assim, realizando a transformada de Fourier em $g_{\mathbf{k}\alpha}^<(t - t')$ e $g_{\mathbf{k}\alpha}^a(t - t')$, temos:

$$\begin{aligned} g_{\mathbf{k}\alpha}^<(t - t') &= if(\epsilon_{\mathbf{k}\alpha}) \exp[-i\epsilon_{\mathbf{k}\alpha}(t - t')] \rightarrow g_{\mathbf{k}\alpha}^<(\epsilon_{\mathbf{k}}) = if(\epsilon)\delta(\epsilon - \epsilon_{\mathbf{k}}) \\ g_{\mathbf{k}\alpha}^a(t - t') &= \mp i\theta(\pm t \mp t') \exp[-i\epsilon_{\mathbf{k}\alpha}(t - t')] \rightarrow g_{\mathbf{k}\alpha}^a(\epsilon) = 1/(\epsilon - \epsilon_{\mathbf{k}} - i\omega/2) \end{aligned} \quad (5.22)$$

No termo com G_{nm}^r da Equação 5.11, transformando a soma sobre $\mathbf{k}$ em integral, temos:

$$\begin{aligned} J_L^{\text{primeiro termo}} &= \frac{2e}{\hbar} \int \frac{d\epsilon}{2\pi} Re \left\{ \sum_{\mathbf{k}, \alpha \in L; n, m} V_{\mathbf{k}\alpha, n} V_{\mathbf{k}\alpha, m}^* G_{nm}^r(\epsilon) g_{\mathbf{k}\alpha}^<(\epsilon) \right\}, \\ &= \frac{2e}{\hbar} \int \frac{d\epsilon}{2\pi} \int d\epsilon_{\mathbf{k}} Re \left\{ \Gamma_{mn}^L(\epsilon_{\mathbf{k}}) G_{nm}^r(\epsilon) i\delta(\epsilon - \epsilon_{\mathbf{k}}) f_L(\epsilon_{\mathbf{k}}) \right\}, \\ &= \frac{2e}{\hbar} \int d\epsilon 2\pi \int d\epsilon_{\mathbf{k}} \Gamma_{mn}^L(\epsilon_{\mathbf{k}}) Re \left\{ G_{nm}^r(\epsilon) i\delta(\epsilon - \epsilon_{\mathbf{k}}) f_L(\epsilon_{\mathbf{k}}) \right\}, \\ &= \frac{2e}{\hbar} \int \frac{d\epsilon}{2\pi} f_L(\epsilon) \Gamma^L(\epsilon) Re \left[iG^r(\epsilon) \right], \\ &= -\frac{2e}{\hbar} \int \frac{d\epsilon}{2\pi} f_L(\epsilon) \Gamma^L(\epsilon) Im \left[G^r(\epsilon) \right], \\ &= \frac{ie}{\hbar} \int \frac{d\epsilon}{2\pi} \Gamma^L(\epsilon) f_L(\epsilon) \left[G^r(\epsilon) - G^a(\epsilon) \right]. \end{aligned} \quad (5.23)$$

De forma análoga, o segundo termo da Equação 5.11 fica:

$$\begin{aligned} J_L^{\text{segundo termo}} &= \frac{2e}{\hbar} \int \frac{d\epsilon}{2\pi} Re \left\{ \sum_{\mathbf{k}, \alpha \in L; n, m} V_{\mathbf{k}\alpha, n} V_{\mathbf{k}\alpha, m}^* G_{nm}^<(\epsilon) g_{\mathbf{k}\alpha}^a(\epsilon) \right\}, \\ &= \frac{2e}{\hbar} \int \frac{d\epsilon}{2\pi} \int d\epsilon_{\mathbf{k}} \left\{ \Gamma_{mn}^L(\epsilon_{\mathbf{k}}) G_{nm}^<(\epsilon) \frac{i}{2} \delta(\epsilon - \epsilon_{\mathbf{k}}) \right\}, \\ &= \frac{ie}{\hbar} \int \frac{d\epsilon}{2\pi} \Gamma_{mn}^L(\epsilon) G_{nm}^<(\epsilon). \end{aligned} \quad (5.24)$$

Logo,

$$\begin{aligned} J_L &= \frac{ie}{\hbar} \int \frac{d\epsilon}{2\pi} \sum_{m, n} \left(\Gamma_{mn}^L(\epsilon) G_{nm}^<(\epsilon) + f_L(\epsilon) \Gamma_{mn}^L(\epsilon) \left[G_{nm}^r(\epsilon) - G_{nm}^a(\epsilon) \right] \right) \\ &= \frac{ie}{\hbar} \int \frac{d\epsilon}{2\pi} \sum_m \left(\left[\Gamma^L(\epsilon) G^<(\epsilon) \right]_{mm} + f_L(\epsilon) \left[\Gamma^L(\epsilon) (G^r(\epsilon) - G^a(\epsilon)) \right]_{mm} \right) \\ &= \frac{ie}{\hbar} \int \frac{d\epsilon}{2\pi} Tr \left[\Gamma^L(\epsilon) \left\{ G^<(\epsilon) + f_L(\epsilon) [G^r(\epsilon) - G^a(\epsilon)] \right\} \right] \end{aligned} \quad (5.25)$$

O mesmo pode ser aplicado ao terminal direito, só mudar o índice $L \rightarrow R$. Assim, de forma compacta:

$$J_{L(R)} = \frac{ie}{\hbar} \int \frac{d\epsilon}{2\pi} Tr \left[\Gamma^{L(R)}(\epsilon) \left\{ G^<(\epsilon) + f_{L(R)}(\epsilon) [G^r(\epsilon) - G^a(\epsilon)] \right\} \right] \quad (5.26)$$

No caso estacionário, a corrente será uniforme, tal que $J = J_L = -J_R$, e podemos simetrizar $J = (J_L + J_R)/2 = (J_L - J_R)/2$. Assim, temos a expressão geral para uma corrente *d.c.*:

$$J = \frac{ie}{2\hbar} \int \frac{d\epsilon}{2\pi} Tr \left\{ \left[\Gamma^L(\epsilon) - \Gamma^R(\epsilon) \right] G^<(\epsilon) + \left[f_L(\epsilon) \Gamma^L(\epsilon) - f_R(\epsilon) \Gamma^R(\epsilon) \right] \left[G^r(\epsilon) - G^a(\epsilon) \right] \right\}. \quad (5.27)$$

Em geral, a dependência energética da função de largura de nível Γ não é muito importante, podendo ser feita algumas simplificações. Por exemplo, podemos considerar o caso em que as funções nível de largura do lado esquerdo e direito são proporcionais, isto é, $\Gamma^L(\epsilon) = \lambda \Gamma^R(\epsilon)$. Assim, a corrente pode ser escrita na forma $J \equiv x J_L - (1 - x) J_R$, onde x é um parâmetro que quantifica em qual guia flui mais corrente. Assim,

$$J = \frac{ie}{\hbar} \int \frac{d\epsilon}{2\pi} \text{Tr} \left(\Gamma^R(\epsilon) \left\{ [\lambda x - (1 - x)] G^<(\epsilon) + [\lambda x f_L - (1 - x) f_R] [G^r(\epsilon) - G^a(\epsilon)] \right\} \right), \quad (5.28)$$

fixando $x = 1/(1 + \lambda)$, o primeiro termo desaparece, e obtemos:

$$J = \frac{ie}{\hbar} \int \frac{d\epsilon}{2\pi} [f_L(\epsilon) - f_R(\epsilon)] \mathcal{T}(\epsilon), \quad (5.29)$$

onde:

$$\mathcal{T}(\epsilon) = \text{Tr} \left\{ \frac{\Gamma^L(\epsilon) \Gamma^R(\epsilon)}{\Gamma^L(\epsilon) + \Gamma^R(\epsilon)} [G^r(\epsilon) - G^a(\epsilon)] \right\}. \quad (5.30)$$

A Equação 5.29 é conhecida como fórmula de Meir-Wingreen obtida em (MEIR; WINGREEN, 1992) e também abordada em (HAUG; JAUHO, 2008). Embora existam algumas considerações, como o caso estacionário e que as funções nível de largura de terminais distintos sejam proporcionais, é importante perceber que $\mathcal{T}(\epsilon)$ pode incorporar fenômenos dentro do ponto quântico como espalhamento de spin, processos inelásticos, interação elétron-elétron, interação elétron-fônon e etc.

Para o caso não interagente, (MEIR; WINGREEN, 1992) afirma que as equações de Dyson para a região de interação podem ser escritas da seguinte forma:

$$\begin{aligned} G^< &= i f_L(\epsilon) G^r \Gamma^L G^a + i f_R(\epsilon) G^r \Gamma^R G^a, \\ G^r - G^a &= -i G^r (\Gamma^L + \Gamma^R) G^a \end{aligned} \quad (5.31)$$

Assim, substituindo as Equações 5.31 na Equação 5.27, obtemos:

$$J = \frac{e}{\hbar} \int d\epsilon [f_L(\epsilon) - f_R(\epsilon)] \text{Tr} [G^a \Gamma^R G^r \Gamma^L], \quad (5.32)$$

dado que o coeficiente de transmissão pode ser escrito em termos da função de Green retardada por

$$t_{\alpha, \alpha'} \equiv 2\pi \sum_{n, m} \rho_{\alpha}^{1/2} \rho_{\alpha'}^{1/2} V_{\alpha, n}^* G_{n, m}^r V_{\alpha', m}, \quad (5.33)$$

onde $\alpha \in R, \alpha' \in L$, podemos escrever a corrente J como:

$$J = \frac{e}{\hbar} \int d\epsilon [f_L(\epsilon) - f_R(\epsilon)] T(\epsilon), \quad (5.34)$$

onde:

$$T(\epsilon) \equiv \text{Tr} [t t^\dagger(\epsilon)] \quad (5.35)$$

é conhecido como coeficiente de transmissão. A equação 5.34 é conhecida como fórmula de Landauer-Buttiker para dois terminais no caso não-interagente, encontrada em (BLANTER; BÜTTIKER, 2000).

Quando estamos estudando pontos quânticos caóticos, devemos ter em mente que a dimensão do ponto quântico é muito maior que a largura do terminal. Este fato justifica que a quantidade de ressonâncias na região de interação é muito maior que os canais abertos nos terminais. Devido a grande quantidade de ressonâncias, é normal considerar que não há interação alguma entre os elétrons que estão dentro da região de interação. Portanto, o estudo de pontos quânticos caóticos se encaixa ao caso não-interagente.

5.3 Condutância e Ruído em um Ponto Quântico Caótico

Na área de transporte eletrônico, é importante relacionar a corrente e a estrutura do material por qual a corrente atravessa. A propriedade associada a esta relação é chamada de condutância. Em um espalhamento eletrônico em pontos quânticos caóticos, a condutância é obtida da seguinte forma (BLANTER; BÜTTIKER, 2000):

$$G = \frac{e^2}{2\pi\hbar} \text{Tr}[tt^\dagger] = \frac{e^2}{2\pi\hbar} T(\epsilon). \quad (5.36)$$

Como já falamos, os elétrons se movimentam através dos terminais com energias bem definidas chamadas de canais abertos. Em geral, os canais possuem diferentes energias, fazendo com que a energia do elétron seja diretamente relacionada aos canais abertos. Como a mecânica quântica é uma área probabilística, os autovalores da matriz $tt^\dagger$ representam a probabilidade do elétron passar do guia esquerdo para o direito. O traço na Equação 5.36 representa uma soma sobre todos os canais abertos. Assim, podemos obter uma relação entre a condutância em um ponto quântico caótico e o número de canais abertos.

A média e a variância da condutância para um ponto quântico caótico podem ser encontradas em (BROUWER; BEENAKKER, 1996):

$$\begin{aligned} \langle G/G_0 \rangle &= \frac{N_1 N_2}{(N_1 + N_2) - 1 + \frac{2}{\beta}}, \\ \text{var}(G/G_0) &= \frac{2\beta N_1 N_2 (\beta N_1 + 2 - \beta)(\beta N_2 + 2 - \beta)}{(\beta(N_1 + N_2) + 2 - 2\beta)(\beta(N_1 + N_2) + 2 - \beta)^2(\beta(N_1 + N_2) + 4 - \beta)}. \end{aligned} \quad (5.37)$$

onde β indica a simetria, $G_0 = e^2/2\pi\hbar$, N_1 e N_2 representam a quantidade de canais no guia esquerdo e direito, respectivamente.

O ruído pode ser obtido de forma geral em um regime de não-equilíbrio. Matematicamente, o ruído é definido como a função auto-correlação dos operadores de flutuação de corrente:

$$S_{\eta\eta'}(t, t') = \langle \{ \delta \hat{I}_\eta(t), \delta \hat{I}_{\eta'}(t') \} \rangle = \langle \{ \hat{I}_\eta(t), \hat{I}_{\eta'}(t') \} \rangle - 2I_\eta I_{\eta'}, \quad (5.38)$$

onde $\delta \hat{I}_\eta = \hat{I}_\eta(t) - I_\eta$ é o operador de flutuação de corrente em relação a média no guia η , sendo $I_\eta = \langle \hat{I}_\eta(t) \rangle$ a média. Desta forma, o ruído pode ser obtido experimentalmente

analisando as flutuações da corrente ao longo do tempo. Baseado na Equação 5.7, podemos construir o operador corrente como sendo:

$$\hat{I}_\eta(t) = \frac{ie}{\hbar} \sum_{n,\mathbf{k},\alpha \in L,R} [V_{\mathbf{k}\alpha,n} c_{\mathbf{k}\alpha}^\dagger(t) d_n(t) - V_{\mathbf{k}\alpha,n}^* d_n^\dagger(t) c_{\mathbf{k}\alpha}(t)]. \quad (5.39)$$

Substituindo o operador corrente $\hat{I}_\eta(t)$ em $S_{\eta\eta'}(t,t')$, temos:

$$\begin{aligned} S_{\eta\eta'}(t,t') = \left(\frac{ie}{\hbar}\right)^2 \sum_{n,n',\mathbf{k},\mathbf{k}',\alpha,\alpha' \in L,R} \Big\{ & V_{\mathbf{k}\alpha,n} V_{\mathbf{k}'\alpha',n'} \langle c_{\mathbf{k}\alpha,n}^\dagger(t) d_n(t) c_{\mathbf{k}'\alpha',n'}^\dagger(t') d_{n'}(t') \rangle \\ & - V_{\mathbf{k}\alpha,n} V_{\mathbf{k}'\alpha',n'}^* \langle c_{\mathbf{k}\alpha,n}^\dagger(t) d_n(t) d_{n'}^\dagger(t') c_{\mathbf{k}'\alpha',n'}(t') \rangle \\ & - V_{\mathbf{k}\alpha,n}^* V_{\mathbf{k}'\alpha',n'} \langle d_n^\dagger(t) c_{\mathbf{k}\alpha,n}(t) c_{\mathbf{k}'\alpha',n'}^\dagger(t') d_{n'}(t') \rangle \\ & + V_{\mathbf{k}\alpha,n}^* V_{\mathbf{k}'\alpha',n'}^* \langle d_n^\dagger(t) c_{\mathbf{k}\alpha,n}(t) d_{n'}^\dagger(t') c_{\mathbf{k}'\alpha',n'}(t') \rangle \Big\}. \end{aligned} \quad (5.40)$$

Vamos definir as funções de Green

$$\begin{aligned} g_1^{(2)>}(t,t') &= i^2 \langle c_{\mathbf{k}\alpha,n}^\dagger(t) d_n(t) c_{\mathbf{k}'\alpha',n'}^\dagger(t') d_{n'}(t') \rangle, \\ g_2^{(2)>}(t,t') &= i^2 \langle c_{\mathbf{k}\alpha,n}^\dagger(t) d_n(t) d_{n'}^\dagger(t') c_{\mathbf{k}'\alpha',n'}(t') \rangle, \\ g_3^{(2)>}(t,t') &= i^2 \langle d_n^\dagger(t) c_{\mathbf{k}\alpha,n}(t) c_{\mathbf{k}'\alpha',n'}^\dagger(t') d_{n'}(t') \rangle, \\ g_4^{(2)>}(t,t') &= i^2 \langle d_n^\dagger(t) c_{\mathbf{k}\alpha,n}(t) d_{n'}^\dagger(t') c_{\mathbf{k}'\alpha',n'}(t') \rangle, \end{aligned} \quad (5.41)$$

onde o sobre escrito (2) em $g_i^{(2)>}$ serve pra indicar que estamos trabalhando com o propagador de duas partículas. Dessa forma, podemos escrever o ruído como

$$\begin{aligned} S_{\eta\eta'}(t,t') = \left(\frac{e}{\hbar}\right)^2 \sum_{n,n',\mathbf{k},\mathbf{k}',\alpha,\alpha' \in L,R} \Big\{ & V_{\mathbf{k}\alpha,n} V_{\mathbf{k}'\alpha',n'} g_1^{(2)>}(t,t') - V_{\mathbf{k}\alpha,n} V_{\mathbf{k}'\alpha',n'}^* g_2^{(2)>}(t,t') \\ & - V_{\mathbf{k}\alpha,n}^* V_{\mathbf{k}'\alpha',n'} g_3^{(2)>}(t,t') + V_{\mathbf{k}\alpha,n}^* V_{\mathbf{k}'\alpha',n'}^* g_4^{(2)>}(t,t') \Big\} + h.c. - 2I_\eta I_{\eta'}. \end{aligned} \quad (5.42)$$

Semelhante ao cálculo da corrente J_L , em que tínhamos a função de Green $G_{n,\mathbf{k}\alpha}^<(t,t)$ e queríamos encontrar sua expressão, aqui precisamos calcular as funções $g_i^{(2)>}$. De forma semelhante, exploramos a similaridade da estrutura matemática de uma teoria de equilíbrio e não-equilíbrio, devemos definir $g_i^{(2)>}(\tau,\tau')$ sobre o plano complexo, fazer a expansão da matriz S e obter $g_i^{(2)>}(t,t')$ via continuação analítica. A dedução do ruído $S_{\eta\eta'}$ é extensa, porém pode ser encontrada no Apêndice B de (SOUZA, 2004):

$$\begin{aligned} S_{LL}(\omega \rightarrow 0) = \frac{2e^2}{\hbar} \int \frac{d\epsilon}{2\pi} \text{Tr} \Big\{ & (if_L \Gamma^L G^> - i[1 - f_L] \Gamma^L G^<) \\ & + (G^r - G^a)(f_L \Gamma^L G^> \Gamma^L - [1 - f_L] \Gamma^L G^< \Gamma^L) \\ & - f_L[1 - f_L](G^a \Gamma^L G^a \Gamma^L + G^r \Gamma^R G^r \Gamma^R) + G^< \Gamma^L G^> \Gamma^L \Big\}, \end{aligned} \quad (5.43)$$

onde $\eta = \eta' = L$. Experimentalmente, o limite de frequência nula corresponde a frequências entre 1kHz e 100 kHz, que é uma faixa de frequências em que o ruído é aproximadamente

constante (NAUEN et al., 2004). Para obter os ruídos em relação a outros terminais, temos a relação $S_{LL} = S_{RR} = -S_{LR} = -S_{RL}$, propriedade que também pode ser vista em (SOUZA, 2004).

Para o caso de pontos quânticos caóticos, o que determina a energia no ponto quântico é somente as ressonâncias. Assim, no regime de baixas temperaturas $k_B T \ll eV$, temos que $f_L = \Theta(\epsilon - \mu)$ de tal forma que:

$$\begin{aligned} S_{LL}(0) &= \frac{2e^2}{\hbar} \int \frac{d\epsilon}{2\pi} \Theta(\epsilon - \mu) \sum_{\sigma} \{i\Gamma_{\sigma}^L G_{\sigma\sigma}^> + \\ &\quad (G_{\sigma\sigma}^r - G_{\sigma\sigma}^a) \Gamma_{\sigma}^L G_{\sigma\sigma}^> \Gamma_{\sigma}^L + G_{\sigma\sigma}^< \Gamma_{\sigma}^L G_{\sigma\sigma}^> \Gamma_{\sigma}^L\} \\ &= \frac{2e^2}{\hbar} \int \frac{d\epsilon}{2\pi} \Theta(\epsilon - \mu) \sum_{\sigma} i\Gamma_{\sigma}^L G_{\sigma\sigma}^> \{1 - i(G_{\sigma\sigma}^r - G_{\sigma\sigma}^a) \Gamma_{\sigma}^L + iG_{\sigma\sigma}^< \Gamma_{\sigma}^L\}, \end{aligned} \quad (5.44)$$

vamos usar agora o fato de que $G^r - G^a = G^> - G^<$:

$$S_{LL}(0) = \frac{2e^2}{\hbar} \int \frac{d\epsilon}{2\pi} \Theta(\epsilon - \mu) \sum_{\sigma} i\Gamma_{\sigma}^L G_{\sigma\sigma}^L \{1 - i\Gamma_{\sigma}^L G_{\sigma\sigma}^>\}. \quad (5.45)$$

Definindo $T_0^{\sigma} = i\Gamma_{\sigma}^L G_{\sigma\sigma}^>$ e sabendo que $\mu = e|V|$, escrevemos:

$$S_{LL}(0) = \frac{2e^2}{\hbar} \int \frac{d\epsilon}{2\pi} \Theta(\epsilon - \mu) \sum_{\sigma} T_0^{\sigma} (1 - T_0^{\sigma}) = \frac{e^3 |V|}{\pi \hbar} \text{Tr} [t^{\dagger} t (\mathbb{1} - t^{\dagger} t)], \quad (5.46)$$

que é a fórmula de Landauer-Buttiker para o ruído (BLANTER; BÜTTIKER, 2000). O subscrito "0" em T_0^{σ} indica que estamos tratando o sistema em baixas temperaturas. Como já comentamos, o traço representa uma soma sobre todos os canais abertos. Além disso, é importante lembrar que $r^{\dagger} r = 1 - t^{\dagger} t$. Assim, é comum encontrar o ruído sendo escrito na forma:

$$S_{LL}(0) = \frac{e^3 |V|}{\pi \hbar} \text{Tr} [r^{\dagger} r t^{\dagger} t]. \quad (5.47)$$

Fisicamente, o ruído representa a auto-correlação das oscilações da corrente no tempo. Entretanto, por meio do processamento de sinais, o ruído é calculado experimentalmente em relação a frequência. O ruído é aproximadamente constante com poucas oscilações para frequências baixas, podendo ser visto na Figura 19.

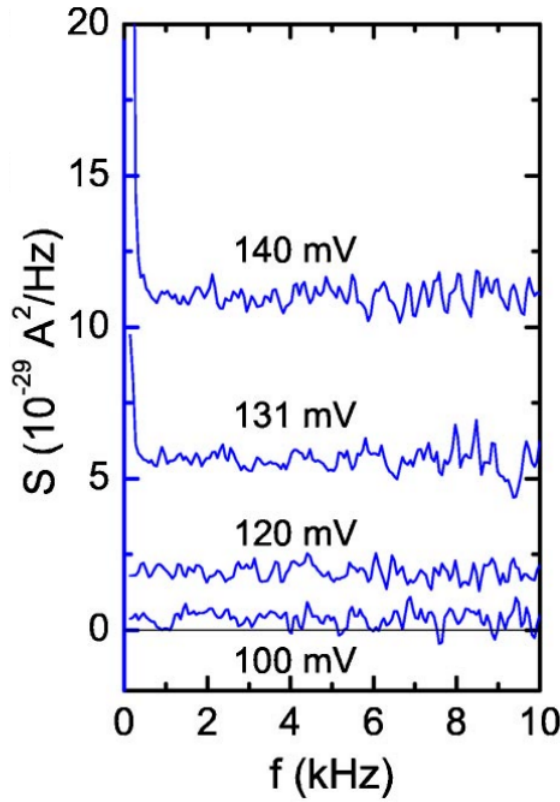


Figura 19 – Potência do ruído de disparo $S_{LL}(\omega \rightarrow 0)$ mostrado experimentalmente em um ponto quântico em uma temperatura de $T = 1.5K$. Dependendo da energia, o ruído é constante. Para energias suficientemente altas ($\Delta V \geq 131mV$), podemos ver que o ruído cresce a medida que a frequência diminui. O ruído de disparo as vezes é chamado de ruído de Poisson devido a sua distribuição. Figura retirada de (NAUEN et al., 2004).

Quando tomamos o limite $k_B T \ll eV$, eliminamos todas as contribuições térmicas do ruído S_{LL} . Assim, a justificativa de ter um ruído em baixas temperaturas está na propriedade da mecânica quântica associada as incertezas intrínsecas do sistema físico. Quando eliminamos a dependência térmica e expressamos o ruído em relação a frequência, chamamos $S_{LL}(\omega \rightarrow 0)$ de potência do ruído de disparo.

O estudo da potência do ruído de disparo é de grande importância pois esta grandeza pode ser usada para identificar violações da desigualdade de Bell em sistemas mesoscópicos, como veremos no próximo capítulo.

6 Emaranhamento Quântico

6.1 Paradoxo EPR e Desigualdade de Bell

(EINSTEIN et al., 1935) forneceram um argumento de que a mecânica quântica estava incompleta e que eram necessárias variáveis adicionais para restaurar a causalidade e localidade da teoria. Com o exemplo mostrado por (BOHM; AHARONOV, 1957), o argumento EPR é descrito a seguir. Considere um par de partículas de spin semi inteiro formado em um estado de spin singlete e movendo-se livremente em direções opostas. Medições podem ser realizadas utilizando magnetos como no experimento de Stern-Gerlach. Se a medição da componente $\vec{\sigma}_1 \cdot \vec{a}$ produz o valor $+1$, onde $\vec{a}$ é um vetor unitário que representa a direção do campo magnético, então, de acordo com a mecânica quântica, a medição $\vec{\sigma}_2 \cdot \vec{a}$ produz o valor -1 e vice-versa. É importante fazer a hipótese de que as medições serão feitas em lugares remotos, não havendo alguma influência entre as medições por uma teoria real e local. Assim, condiderando uma variável oculta λ , o resultado A da medição $\vec{\sigma}_1 \cdot \vec{a}$ será determinado por $\vec{a}$ e λ , e o resultado B da medição $\vec{\sigma}_2 \cdot \vec{b}$ por $\vec{b}$ e λ . Desta forma, temos:

$$A(\vec{a}, \lambda) = \pm 1, \quad B(\vec{b}, \lambda) = \pm 1. \quad (6.1)$$

Note que o resultado B não depende da escolha da direção do magneto $\vec{a}$ e o resultado A não depende da escolha $\vec{b}$. Vamos assumir uma distribuição de probabilidade $\rho(\lambda)$, então o valor esperado do produto das componentes $\vec{\sigma}_1 \cdot \vec{a}$ e $\vec{\sigma}_2 \cdot \vec{b}$ por uma teoria de variáveis ocultas é:

$$P(\vec{a}, \vec{b}) = \int d\lambda \rho(\lambda) A(\vec{a}, \lambda) B(\vec{b}, \lambda). \quad (6.2)$$

Para uma teoria local e real, este valor deveria ser o mesmo que o valor esperado pela mecânica quântica, que para um estado singlete é dado por:

$$\langle \vec{\sigma}_1 \cdot \vec{a} \vec{\sigma}_2 \cdot \vec{b} \rangle = -\vec{a} \cdot \vec{b}. \quad (6.3)$$

Em geral, veremos que a Equação 6.2 não é capaz de reproduzir os mesmos resultados que a Equação 6.3 e, portanto, uma teoria local e real de variáveis ocultas não é capaz de fornecer as predições estatísticas da mecânica quântica. A contradição pode ser vista pelo seguinte argumento. Vamos considerar uma distribuição de probabilidade $\rho(\lambda) = 1$ tal que:

$$\int d\lambda \rho(\lambda) = 1. \quad (6.4)$$

Vamos definir agora as funções $\overline{P}(\vec{a}, \vec{b})$ e $-\vec{a} \cdot \vec{b}$ em vez de trabalhar com a Equação 6.2 e a Equação 6.3, onde a barra denota médias independentes sobre vetores $\vec{a}'$ e $\vec{b}'$ com pequenos

ângulos em relação a $\vec{a}$ e $\vec{b}$, respectivamente. Assim, vamos assumir que o valor absoluto da diferença entre $\overline{P}(\vec{a}, \vec{b})$ e $-\vec{a} \cdot \vec{b}$ é menor que um ϵ arbitrário:

$$|\overline{P}(\vec{a}, \vec{b}) + \vec{a} \cdot \vec{b}| \leq \epsilon. \quad (6.5)$$

Nosso objetivo é mostrar que dado um δ tal que:

$$|\overline{\vec{a} \cdot \vec{b}} - \vec{a} \cdot \vec{b}| \leq \delta, \quad (6.6)$$

não é possível encontrar um ϵ suficientemente pequeno na Equação 6.5. No Apêndice D, encontramos a desigualdade deduzida por Bell:

$$4(\epsilon + \delta) \geq \sqrt{2} - 1. \quad (6.7)$$

Assim, dado um δ , não é possível encontrar um ϵ arbitrariamente pequeno. Desta forma, o valor esperado da mecânica quântica não pode ser representado pela Equação 6.2.

Embora Bell tenha fornecido um grande avanço com sua desigualdade no aparente paradoxo EPR, (CLAUSER et al., 1969) propuseram a desigualdade mais abordada na literatura. Considere a quantidade:

$$\mathcal{S}_{CHSH} = A(\lambda, \vec{a})B(\lambda, \vec{b}) - A(\lambda, \vec{a})B(\lambda, \vec{b}') + A(\lambda, \vec{a}')B(\lambda, \vec{b}) + A(\lambda, \vec{a}')B(\lambda, \vec{b}'), \quad (6.8)$$

que pode ser escrita na forma:

$$\mathcal{S}_{CHSH} = A(\lambda, \vec{a})[B(\lambda, \vec{b}) - B(\lambda, \vec{b}')] + A(\lambda, \vec{a}')[B(\lambda, \vec{b}) + B(\lambda, \vec{b}')]. \quad (6.9)$$

Como A e B só podem assumir valores ± 1 , temos:

$$\mathcal{S}_{CHSH}(\lambda, \vec{a}, \vec{a}', \vec{b}, \vec{b}') = \pm 2. \quad (6.10)$$

A média de $\mathcal{S}_{CHSH}$ em relação a λ fica:

$$-2 \leq \int d\lambda \rho(\lambda) \mathcal{S}_{CHSH}(\lambda, \vec{a}, \vec{a}', \vec{b}, \vec{b}') \leq 2. \quad (6.11)$$

Usando a Equação 6.2, obtemos:

$$\mathcal{S}_{CHSH}(\vec{a}, \vec{a}', \vec{b}, \vec{b}') = P(\vec{a}, \vec{b}) - P(\vec{a}, \vec{b}') + P(\vec{a}', \vec{b}) + P(\vec{a}', \vec{b}'), \text{ onde } |\mathcal{S}_{CHSH}| \leq 2. \quad (6.12)$$

Assim, para uma teoria de variáveis ocultas, a desigualdade na Equação 6.12 deve ser válida.

A mecânica quântica mostra que os estados de Bell violam esta desigualdade. O par de Bell para férmions é dado pelo singlete:

$$|\Psi\rangle = \frac{|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle}{\sqrt{2}}. \quad (6.13)$$

Com este estado, podemos ver no Apêndice E que obtemos $|\mathcal{S}_{CHSH}| = 2\sqrt{2}$, violando a desigualdade na Equação 6.12.

6.2 Emaranhamento Quântico em Pontos Quânticos Caóticos

O emaranhamento quântico é uma propriedade que pode ser encontrada tanto em sistemas fotônicos quanto em fermiônicos. Nosso interesse é investigar o emaranhamento quântico produzido no espalhamento quântico de elétrons em um ponto quântico caótico. Considere o caso do espalhamento de dois elétrons em um sistema constituído por uma região central caótica e dois guias (esquerdo e direito). Assumiremos que há 2 canais abertos independentes em cada guia.

O estado inicial será dado por:

$$|\psi_{in}\rangle = a_1^\dagger a_2^\dagger |0, 0, 0, 0\rangle = |1, 1, 0, 0\rangle. \quad (6.14)$$

Após o espalhamento, o estado de saída $|\psi_{out}\rangle$ pode ser escrito em termos do estado incidente $|\psi_{in}\rangle$ em termos da matriz S :

$$|\psi_{out}\rangle = S |\psi_{in}\rangle. \quad (6.15)$$

O estado espalhado pode ser escrito na forma:

$$|\psi_{out}\rangle = |0, 2\rangle + |2, 0\rangle + |1, 1\rangle. \quad (6.16)$$

onde $|0, 2\rangle$ representa o estado em que há dois elétrons no guia direito, $|2, 0\rangle$ o estado em que há dois elétrons no guia esquerdo e $|1, 1\rangle$ o estado em que há um elétron em cada guia. Podemos escrever os estados $|0, 2\rangle$, $|2, 0\rangle$ e $|1, 1\rangle$ da seguinte forma:

$$\begin{aligned} |0, 2\rangle &= (S_{31}S_{42} - S_{41}S_{32}) |0, 0, 1, 1\rangle, \\ |2, 0\rangle &= (S_{11}S_{22} - S_{21}S_{12}) |1, 1, 0, 0\rangle \end{aligned} \quad (6.17)$$

que são conhecidos como estados separados e

$$\begin{aligned} |1, 1\rangle &= (S_{11}S_{32} - S_{31}S_{12}) |1, 0, 1, 0\rangle + (S_{21}S_{32} - S_{31}S_{22}) |1, 0, 0, 1\rangle \\ &\quad + (S_{11}S_{42} - S_{41}S_{12}) |0, 1, 1, 0\rangle + (S_{21}S_{42} - S_{41}S_{22}) |0, 1, 0, 1\rangle, \end{aligned} \quad (6.18)$$

é o estado emaranhado. Olhando para o estado $|1, 1\rangle$, podemos escrevê-lo da seguinte forma:

$$\begin{aligned} |1, 1\rangle &= \left\{ (S_{11}S_{32} - S_{31}S_{12}) b_3^\dagger b_1^\dagger + (S_{21}S_{32} - S_{31}S_{22}) b_4^\dagger b_1^\dagger \right. \\ &\quad \left. + (S_{11}S_{42} - S_{41}S_{12}) b_3^\dagger b_2^\dagger + (S_{21}S_{42} - S_{41}S_{22}) b_4^\dagger b_2^\dagger \right\} |0\rangle, \\ &= \begin{bmatrix} b_3^\dagger & b_4^\dagger \end{bmatrix} \begin{bmatrix} (S_{11}S_{32} - S_{31}S_{12}) & (S_{21}S_{32} - S_{31}S_{22}) \\ (S_{11}S_{42} - S_{41}S_{12}) & (S_{21}S_{42} - S_{41}S_{22}) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} b_1^\dagger \\ b_2^\dagger \end{bmatrix} |0\rangle. \end{aligned} \quad (6.19)$$

Por outro lado, a matriz de reflexão r e transmissão t nos fornece:

$$\begin{aligned} ir\sigma_y t^T &= i \begin{bmatrix} S_{11} & S_{12} \\ S_{21} & S_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} S_{31} & S_{41} \\ S_{32} & S_{42} \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} (S_{11}S_{32} - S_{31}S_{12}) & (S_{21}S_{32} - S_{31}S_{22}) \\ (S_{11}S_{42} - S_{41}S_{12}) & (S_{21}S_{42} - S_{41}S_{22}) \end{bmatrix}. \end{aligned} \quad (6.20)$$

que é justamente a matriz com os elementos da matriz de espalhamento S em $|1, 1\rangle$. Assim, podemos escrever $|1, 1\rangle$ como:

$$|1, 1\rangle = \begin{bmatrix} b_3^\dagger & b_4^\dagger \end{bmatrix} [ir\sigma_y t^T] \begin{bmatrix} b_1^\dagger \\ b_2^\dagger \end{bmatrix} |0\rangle. \quad (6.21)$$

Este estado é o estado emaranhado $|\Phi\rangle$ encontrado por (BEENAKKER et al., 2003), onde se encontra em (BEENAKKER, 2005) na forma:

$$|\Phi\rangle = w^{-1/2} b_L^\dagger \gamma b_R^\dagger |0\rangle, \quad \gamma = r\sigma_y t^T. \quad (6.22)$$

O w é um fator de normalização e é dado por:

$$w = \text{Tr } \gamma \gamma^\dagger. \quad (6.23)$$

Dado o estado emaranhado $|\Phi\rangle$, estamos interessados em quantificar o emaranhamento deste sistema. Para isso, há um procedimento padrão apresentado por (WOOTTERS, 1998) no qual é possível calcular emaranhamento em um sistema. (BEENAKKER et al., 2003) utilizou os resultados do Wootters para mostrar a formação de emaranhamento em espalhamento de elétrons em pontos quânticos caóticos. Primeiramente, dado um estado $|\psi\rangle$ na forma:

$$|\psi\rangle = \sum_{i=1}^2 \sum_{j=1}^2 \gamma_{ij} |i\rangle_A |j\rangle_B, \quad (6.24)$$

onde i e j representam os canais nos terminais, podemos calcular o operador densidade parcial em respeito a um dos terminais:

$$\begin{aligned} \rho_A &= \text{Tr}_B |\psi\rangle \langle\psi| = \text{Tr}_B \left\{ \left[\sum_{i=1}^2 \sum_{j=1}^2 \gamma_{ij} |i\rangle_A |j\rangle_B \right] \left[\sum_{i'=1}^2 \sum_{j'=1}^2 \gamma_{j'i'}^* \langle i'|_A \langle j'|_B \right] \right\} \\ &= \text{Tr}_B \left\{ \sum_{i,i',j,j'=1}^2 \gamma_{ij} \gamma_{j'i'}^* |i\rangle_A \langle i'|_A \otimes |j\rangle_B \langle j'|_B \right\} \\ &= \sum_{i,i'=1}^2 \left[\sum_{j=1}^2 \gamma_{ij} \gamma_{ji'}^* \right] |i\rangle_A \langle i'|_A \\ &= \sum_{i,i'=1}^2 (\gamma \gamma^\dagger)_{ii'} |i\rangle_A \langle i'|_A. \end{aligned} \quad (6.25)$$

Obtido o estado ρ_A , podemos obter o que chamamos de emaranhamento de formação. Primeiramente definido por Wootters, o emaranhamento de formação conecta o conceito de emaranhamento com informação a partir da equação:

$$\mathcal{E} = -\text{Tr}_A \rho_A \log_2 \rho_A. \quad (6.26)$$

O conceito de informação foi difundido por (SHANNON, 1948). Interessado em uma teoria matemática da comunicação, Shannon buscou uma forma de estudar a relação entre um sistema de comunicações e conceitos matemáticos relacionados a probabilidade. A partir daí, Shannon formulou a equação:

$$H = -K \sum_{i=1}^n p_i \log p_i, \quad (6.27)$$

que descreve a quantidade de informação adquirida em fenômenos probabilísticos, como ruído em sistemas de comunicação, sinais biológicos, índices financeiros e etc. No nosso caso, estamos interessados em calcular a quantidade de informação adquirida na formação de um par emaranhado em um ponto quântico caótico. Assim, o emaranhamento de formação fica:

$$\begin{aligned} \mathcal{E} &= -\text{Tr}_A \rho_A \log_2 \rho_A \\ &= -\text{Tr}_A \left\{ \sum_{i,i'=1}^2 (\gamma \gamma^\dagger)_{ii'} |i\rangle_A \langle i'|_A \log_2 \sum_{k,k'=1}^2 (\gamma \gamma^\dagger)_{kk'} |k\rangle_A \langle k'|_A \right\}. \end{aligned} \quad (6.28)$$

Porém, para retirarmos a soma dentro do logaritmo, é importante diagonalizar a matriz $\gamma \gamma^\dagger$. Assim,

$$\gamma \gamma^\dagger = \begin{pmatrix} \gamma_{11} & \gamma_{12} \\ \gamma_{21} & \gamma_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \gamma_{11}^* & \gamma_{21}^* \\ \gamma_{12}^* & \gamma_{22}^* \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} |\gamma_{11}|^2 + |\gamma_{12}|^2 & \gamma_{11}\gamma_{21}^* + \gamma_{12}\gamma_{22}^* \\ \gamma_{21}\gamma_{11}^* + \gamma_{22}\gamma_{12}^* & |\gamma_{21}|^2 + |\gamma_{22}|^2 \end{pmatrix} \quad (6.29)$$

diagonalizando $\gamma \gamma^\dagger$ e lembrando que $\text{Tr} \gamma \gamma^\dagger = 1$ para um estado normalizado, temos que os autovalores são dados por:

$$\lambda_{\pm} = \frac{1 \pm \sqrt{1 - 4\det \gamma \gamma^\dagger}}{2}. \quad (6.30)$$

Assim, o estado ρ_A pode ser escrito como:

$$\rho_A = \frac{1 + \sqrt{1 - 4\det \gamma \gamma^\dagger}}{2} |\lambda_+\rangle \langle \lambda_+| + \left[1 - \left(\frac{1 + \sqrt{1 - 4\det \gamma \gamma^\dagger}}{2} \right) \right] |\lambda_-\rangle \langle \lambda_-|, \quad (6.31)$$

e o emaranhamento de formação fica:

$$\begin{aligned} \mathcal{E} &= -\left(\frac{1 + \sqrt{1 - 4\det \gamma \gamma^\dagger}}{2} \right) \log_2 \left(\frac{1 + \sqrt{1 - 4\det \gamma \gamma^\dagger}}{2} \right) \\ &\quad - \left[1 - \left(\frac{1 + \sqrt{1 - 4\det \gamma \gamma^\dagger}}{2} \right) \right] \log_2 \left[1 - \left(\frac{1 + \sqrt{1 - 4\det \gamma \gamma^\dagger}}{2} \right) \right], \end{aligned} \quad (6.32)$$

que pode ser escrito de forma simplificada como:

$$\begin{aligned}\mathcal{E} &= -x \log_2 x - (1-x) \log_2 (1-x) \\ x &= \frac{1 + \sqrt{1 - 4 \det \gamma \gamma^\dagger}}{2}.\end{aligned}\tag{6.33}$$

Note que $\mathcal{E}$ é semelhante a Equação de Shannon 6.27 que expressa a quantidade de informação adquirida em um conjunto de eventos. No nosso caso, estes eventos são as formações de pares emaranhados de elétrons. A quantidade:

$$C = 2\sqrt{\det \gamma \gamma^\dagger}\tag{6.34}$$

é chamada de concorrência para um estado normalizado. Em (WOOTTERS, 1998), é explorado um estado semelhante ao nosso estado (Equação 6.18):

$$|\Phi\rangle = a|0,0\rangle + b|0,1\rangle + c|1,0\rangle + d|1,1\rangle,\tag{6.35}$$

onde $|\Phi\rangle$ é fatorável se e somente se $ad = bc$. Neste caso, se $|\Phi\rangle$ for fatorável, então não é um par emaranhado pois, por definição, um estado emaranhado apresenta uma correlação estatística que não é possível descrever os subsistemas separadamente. Desta forma, podemos usar a quantidade $|ad - bc|$ para quantificar emaranhamento. Se $|ad - bc|$ for nulo, então o estado $|\Phi\rangle$ é fatorável e, conseqüentemente, não emaranhado.

A concorrência para o estado $|\Phi\rangle$ é obtida da seguinte forma:

$$C(\Phi) = |\langle \Phi | \tilde{\Phi} \rangle|, \text{ onde } |\tilde{\Phi}\rangle = (\sigma_y \otimes \sigma_y) |\Phi^*\rangle.\tag{6.36}$$

Assim, realizando os cálculos, obtemos que $C(\Phi) = 2|ad - bc|$. Em espalhamento de elétrons em pontos quântico caóticos, temos que a concorrência do estado $|\Phi\rangle$ na Equação 6.22 é escrita na forma:

$$C = \frac{2\sqrt{\det \gamma \gamma^\dagger}}{w},\tag{6.37}$$

onde $w = \text{Tr } \gamma \gamma^\dagger$.

Podemos escrever a concorrência em termos dos auto-valores da matriz $t^\dagger t$. Lembrando que tais auto-valores representam a probabilidade de transmissão de um canal arbitrário do guia esquerdo para outro canal arbitrário do guia direito. Assim, calculando primeiramente w , temos:

$$\begin{aligned}w &= \text{Tr } \gamma \gamma^\dagger = \text{Tr} \left((r \sigma_y t^T) (r \sigma_y t^T)^\dagger \right) = \text{Tr} \{ (r \sigma_y t^T) t^* \sigma_y r^\dagger \}, \\ &= \text{Tr} \{ r^\dagger r \sigma_y t^T t^* \sigma_y \} = \text{Tr} \{ (\mathbb{1} - t^\dagger t) \sigma_y (t^\dagger t)^T \sigma_y \}.\end{aligned}\tag{6.38}$$

Considerando que:

$$t^\dagger t = \begin{pmatrix} \tau_1 & 0 \\ 0 & \tau_2 \end{pmatrix},\tag{6.39}$$

temos:

$$w = \tau_1 + \tau_2 - 2\tau_1\tau_2. \quad (6.40)$$

Enquanto que:

$$\begin{aligned} \det \gamma \gamma^\dagger &= \det \left[(r\sigma_y t^T)(r\sigma_y t^T)^\dagger \right] = \det(r\sigma_y t^T t^* \sigma_y r^\dagger), \\ &= \det(r^\dagger r \sigma_y t^T t^* \sigma_y) = \det\{(\mathbb{1} - t^\dagger t) \sigma_y (t^\dagger t)^T \sigma_y\}, \\ &= \tau_1(1 - \tau_1)\tau_2(1 - \tau_2), \end{aligned} \quad (6.41)$$

onde usamos o fato de todas as matrizes serem 2×2 . Assim, a concorrência C é obtida por:

$$C = \frac{2\sqrt{\tau_1(1 - \tau_1)\tau_2(1 - \tau_2)}}{\tau_1 + \tau_2 - 2\tau_1\tau_2}. \quad (6.42)$$

Se os auto-valores de transmissão forem suficientemente pequenos $\tau_1, \tau_2 \ll 1$, então a concorrência fica:

$$C \approx \frac{2\sqrt{\tau_1\tau_2}}{\tau_1 + \tau_2}. \quad (6.43)$$

O regime no qual $\tau_1, \tau_2 \ll 1$ é conhecido como o regime opaco ($\Gamma \rightarrow 0$), em que há uma baixa probabilidade do elétron fluir do guia para a região de interação através do ponto de contato ou vice-versa. Assim, a concorrência é um quantificador auxiliar do emaranhamento pois calculando a concorrência, obtemos o emaranhamento usando a Equação 6.33.

Há outra forma de estudarmos o emaranhamento quântico formado em um ponto quântico que é violando a desigualdade de Bell. Para isso, é importante definir a quantidade:

$$C_{ij} = \int_{-\infty}^{\infty} dt \overline{\delta I_{L,i}(t) \delta I_{R,j}(0)}. \quad (6.44)$$

A quantidade C_{ij} fornece, em um domínio de baixas frequências, as correlações entre as flutuações da corrente em um canal i do guia esquerdo $\delta I_{L,i}$ e as flutuações da corrente em um canal j no guia direito $\delta I_{R,j}$. Em baixas temperaturas ($kT \ll eV$), podemos definir o correlator 6.44:

$$C_{ij} = (-e^3 V/h) |(rt^\dagger)_{ij}|^2, \quad (6.45)$$

onde a conexão com o integrando da Equação 5.47 pode ser vista no Apêndice F, resultando:

$$\text{Tr } r^\dagger r t^\dagger t = \sum_{i,k=1}^2 C_{ik} = C_{11} + C_{12} + C_{21} + C_{22}. \quad (6.46)$$

Além disso, é importante também definir um análogo do integrando da Equação 5.47 dado por:

$$\text{Tr } \sigma_z r t^\dagger \sigma_z t r^\dagger = C_{11} + C_{22} - C_{12} - C_{21}, \quad (6.47)$$

cujas igualdades também pode ser vista no Apêndice F. Assim, definindo a razão destes ruídos, temos:

$$E = \frac{\text{Tr } \sigma_z r t^\dagger \sigma_z t r^\dagger}{\text{Tr } r^\dagger r t^\dagger t} = \frac{C_{11} + C_{22} - C_{12} - C_{21}}{C_{11} + C_{12} + C_{21} + C_{22}}. \quad (6.48)$$

Ao mexer localmente nos guias, permitindo embaralhar os canais, temos que as matrizes de reflexão e transmissão se transformam por matrizes unitárias $r \rightarrow U_L r$ e $t \rightarrow U_R t$, nos fornecendo:

$$E(U_L, U_R) = \frac{\text{Tr } U_L^\dagger \sigma_z U_L r t^\dagger U_R^\dagger \sigma_z U_R t r^\dagger}{\text{Tr } r^\dagger r t^\dagger t}. \quad (6.49)$$

Assim, o parâmetro de Bell-CHSH fica (BEENAKKER et al., 2003):

$$\mathcal{S}_{CHSH} = E(U_L, U_R) + E(U_{L'}, U_R) + E(U_L, U_{R'}) - E(U_{L'}, U_{R'}). \quad (6.50)$$

Dado um conjunto U_L , U_R , $U_{L'}$ e $U_{R'}$ de matrizes unitárias, a violação do parâmetro de Bell-CHSH ($|\mathcal{S}_{CHSH}| > 2$) indica que o estado está emaranhado. (POPESCU; ROHRLICH, 1992) mostraram que a violação máxima do parâmetro de Bell-CHSH é dada por:

$$\mathcal{S}_{CHSH/\max} = 2\sqrt{1 + 4\frac{\tau_1\tau_2}{(\tau_1 + \tau_2)^2}} > 2. \quad (6.51)$$

Comparando com a concorrência no regime opaco (Equação 6.43), temos que:

$$\mathcal{S}_{CHSH/\max} = 2\sqrt{1 + C^2}. \quad (6.52)$$

Assim, é estabelecido a relação entre a violação máxima do parâmetro de Bell-CHSH e a concorrência. Devemos ter em mente que a Equação 6.52 fornece dois conceitos distintos: $\mathcal{S}_{CHSH}$ foi obtido a partir do ruído C_{ij} , enquanto que a concorrência C surgiu do cálculo do emaranhamento de formação. Assim, no limite opaco, ruído e emaranhamento possuem uma relação governada pela Equação 6.52.

Como consistência final, podemos estudar o caso em que há efeito de defasagem, ou decoerência, nos guias. A defasagem neste sistema é modelada por fases aleatórias em cada canal:

$$U_L \rightarrow U_L \begin{pmatrix} e^{i\phi_1} & 0 \\ 0 & e^{i\phi_2} \end{pmatrix}, \quad U_R \rightarrow U_R \begin{pmatrix} e^{i\psi_1} & 0 \\ 0 & e^{i\psi_2} \end{pmatrix}, \quad (6.53)$$

onde L e R indicam os guias esquerdo e direito, respectivamente. Assim, realizando uma média de $E(U_L, U_R)$ em fases aleatórias uniformemente distribuídas no intervalo $(0, 2\pi)$, obtemos

$$\mathcal{S}_{CHSH/\max} = \frac{2|\text{Tr } \sigma_z r t^\dagger \sigma_z t r^\dagger|}{\text{Tr } r^\dagger r t^\dagger t} \leq 2. \quad (6.54)$$

A partir daí, podemos simular $\mathcal{S}_{CHSH}$ da Equação 6.50 para verificar violações e $\mathcal{S}_{CHSH/\max}$ para observar que violações não são obtidas quando a defasagem é introduzida.

7 Simulação e Resultados

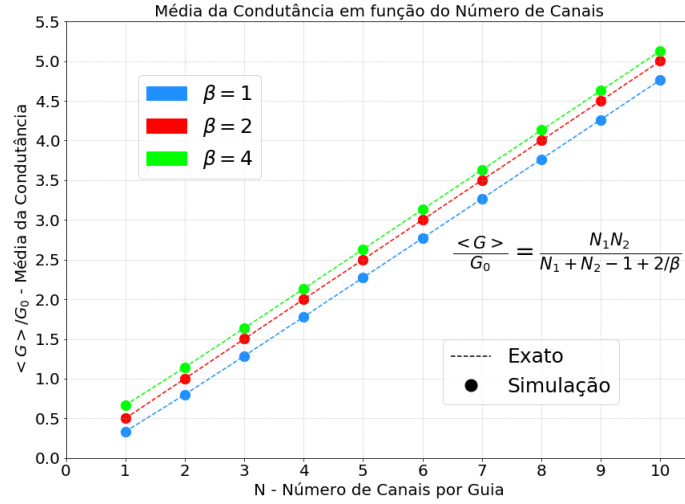
A simulação feita consiste em gerar matrizes aleatórias de acordo com as simetrias ortogonal ($\beta = 1$), unitária ($\beta = 2$) e simplética ($\beta = 4$). Como vamos considerar pontos quânticos caóticos, mudamos a geometria do ponto quântico em cada realização. Assim, a mudança na geometria do ponto quântico foi implementada computacionalmente associando uma matriz aleatória pra cada realização. Dependendo da simetria, precisamos de uma matriz real simétrica e $\beta - 1$ matrizes reais antissimétricas. Podemos supor que o hamiltoniano tenha dimensão M , que consiste na quantidade de ressonâncias na cavidade caótica. Geramos diversos números gaussianos (NG), que são números gerados por variáveis aleatórias regidas por uma distribuição gaussiana de média nula. A variância da distribuição gaussiana depende da simetria. Para matriz simétrica, precisamos de M números gaussianos (NG) com variância de $2\mathcal{V}$ para a sua diagonal e de $M \times (M - 1)/2$ com variância $\mathcal{V}/\beta$ para o restante do triângulo superior, que deve ser igual ao triângulo inferior. Já as matrizes antissimétricas precisam apenas de $M \times (M - 1)/2$ números gaussianos de variância $\mathcal{V}/\beta$ para seu triângulo superior, enquanto que seu triângulo inferior é o negativo do triângulo superior e a diagonal é nula. O $\mathcal{V}$ é obtido pela fórmula $\mathcal{V} = M\Delta^2/\pi^2$, onde M e Δ são o número de ressonâncias e o espaçamento médio entre os níveis de energias (autovalores do hamiltoniano), respectivamente. Para a simulação da condutância e ruído, fizemos 20000 realizações em cada caso de N canais e uma cavidade caótica com 600 ressonâncias. A simulação da concorrência, emaranhamento e violação da desigualdade de Bell foram feitas usando 2 canais abertos em cada guia, 602 ressonâncias e 100000 realizações.

Obtido o hamiltoniano, substituímos H_C na função de Green G^R (Equação 4.37), com energia E nula. Assim, podemos obter a matriz de espalhamento S ou até mesmo o coeficiente de transmissão $\mathcal{T}(\epsilon)$; neste último caso, obtemos $\mathcal{T}(\epsilon)$ substituindo G^R na Equação 5.32.

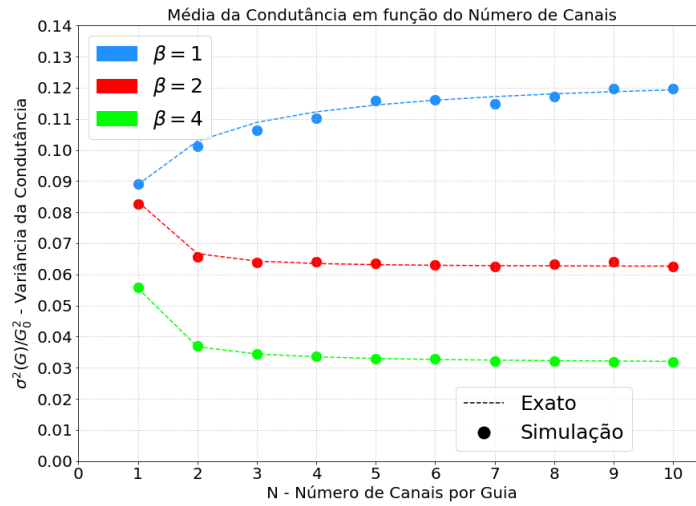
7.1 Condutância

Obtivemos a média e a variância da condutância em relação ao número de canais tomando como parâmetro a simetria β , vista na Figura 20.

No regime quântico, a condutância possui flutuações consideráveis e seu comportamento no tempo é errático em relação a média. Olhando a Figura 20, a medida que aumentamos o número de canais, a média da condutância aumenta, enquanto que variância permanece aproximadamente constante. Como a média aumenta e as flutuações se tornam constantes a medida que aumentamos o número de canais, as flutuações tornam-se cada



(a) Média da Condutância.



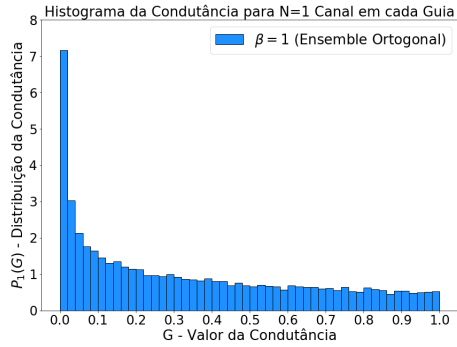
(b) Variância da Condutância.

Figura 20 – Média (a) e Variância (b) da Condutância em relação ao número de canais tomando como parâmetro a simetria β .

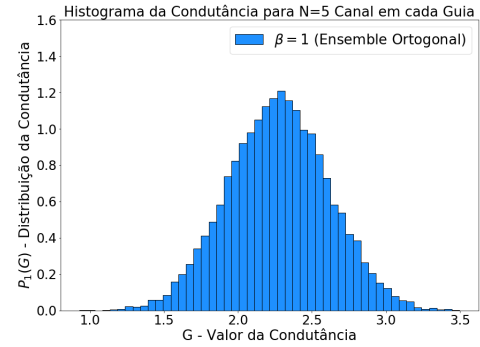
vez menores em relação ao valor médio da condutância. Assim, em um regime clássico, esperamos que tais flutuações tornem-se imperceptíveis.

Em relação as simetrias, note que há uma diferença da média da condutância em relação aos β 's. Essa diferença está relacionada ao termo $2/\beta$ no denominador da Equação 5.37. Este termo é chamado de termo de localização fraca e é um indicador de quanto uma amostra de elétrons está localizado. Este fenômeno surge devido a interferência quântica associada a diferença de caminhos no espalhamento. Quanto maior a condutância, menor será a localização de uma amostra de elétrons. Dependendo da simetria, a condutância pode ser maior ou menor. Visualizando a Figura 20, por exemplo, podemos ver que a média da condutância do ensemble Simplético é maior que no caso do ensemble Unitário; enquanto que a média no ensemble Unitário é maior que no ensemble Ortogonal.

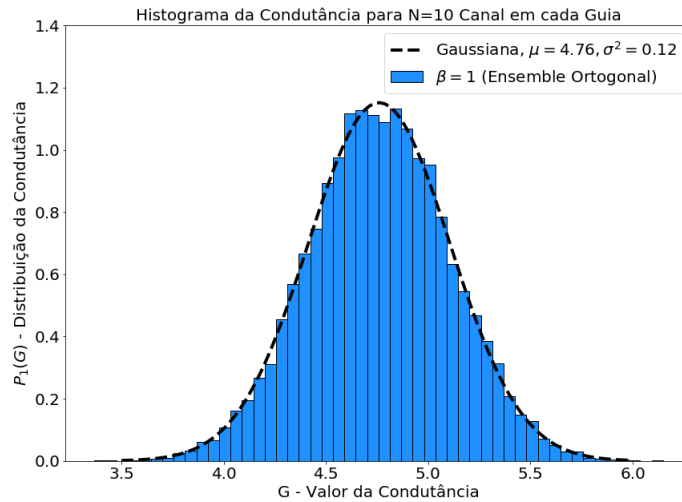
Após isso, obtivemos o histograma da condutância com diferentes números de canais e simetrias. Falando primeiramente na simetria ortogonal, obtivemos os histogramas para os números de canais $N = 1$, $N = 5$ e $N = 10$, mostrado na Figura 21.



(a) Histograma da Condutância no Ensemble Ortogonal para $N = 1$.



(b) Histograma da Condutância no Ensemble Ortogonal para $N = 5$.



(c) Histograma da Condutância no Ensemble Ortogonal para $N = 10$.

Figura 21 – Histogramas da Condutância no Ensemble Ortogonal para os casos $N = 1$, $N = 5$ e $N = 10$.

Para o ensemble unitário, obtivemos os histogramas para os mesmos casos do Ortogonal ($N = 1$, $N = 5$ e $N = 10$); os histogramas são mostrados na Figura 22.

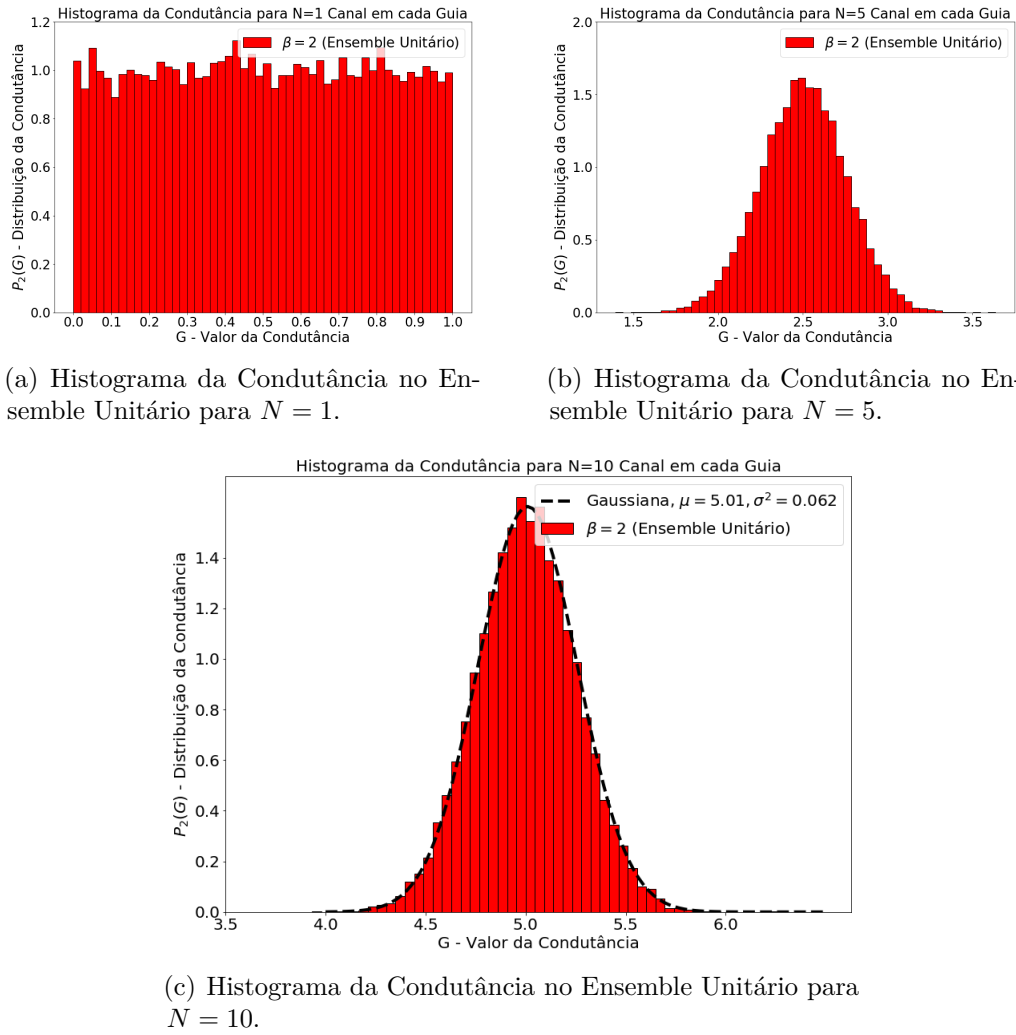
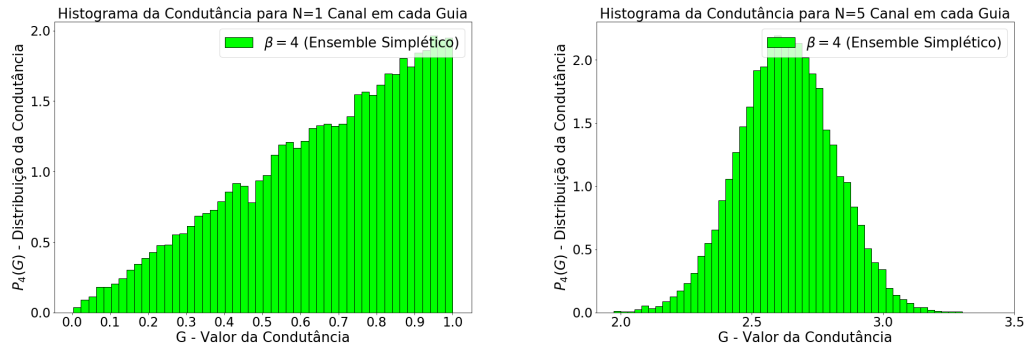


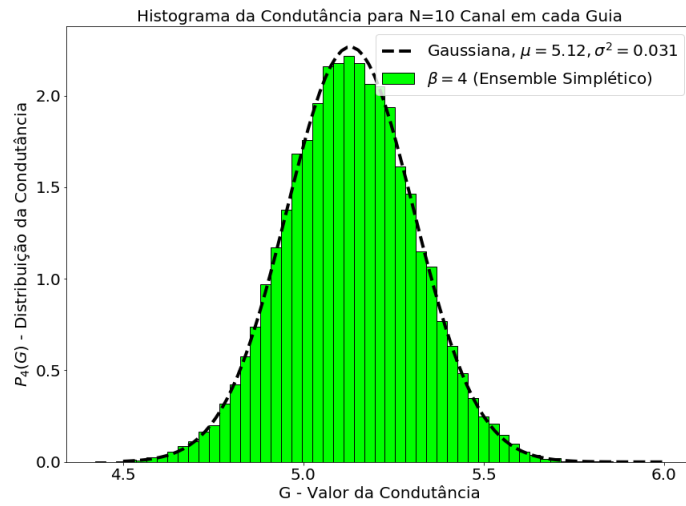
Figura 22 – Histogramas da Condutância no Ensemble Unitário para os casos $N = 1$, $N = 5$ e $N = 10$.

Já para o ensemble simplético, obtivemos os histogramas para os mesmos casos anteriores ($N = 1$, $N = 5$ e $N = 10$); os histogramas são mostrados na Figura 23.



(a) Histograma da Condutância no Ensemble Simplético para $N = 1$.

(b) Histograma da Condutância no Ensemble Simplético para $N = 5$.

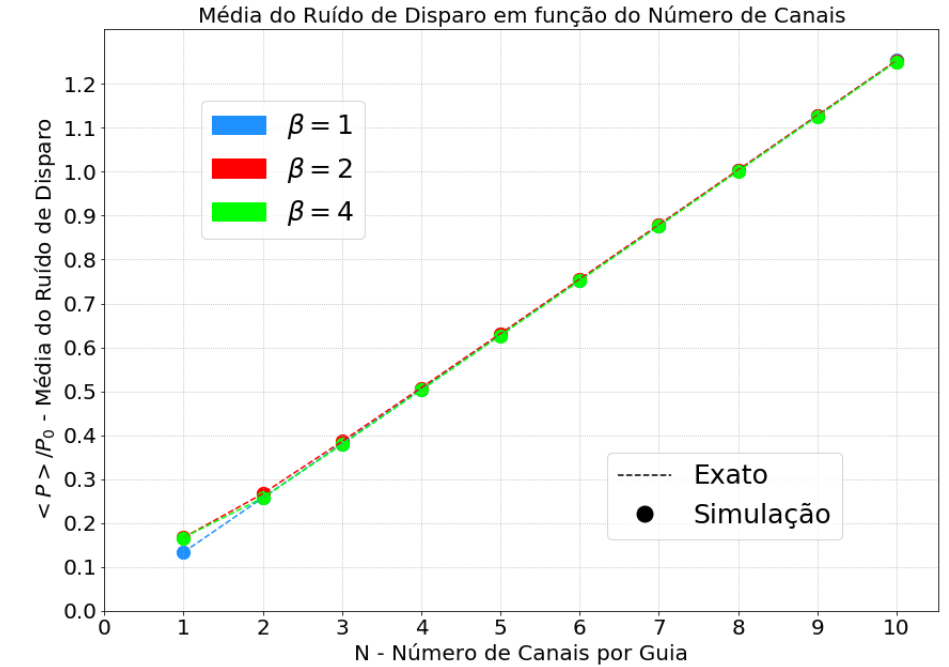


(c) Histograma da Condutância no Ensemble Simplético para $N = 10$.

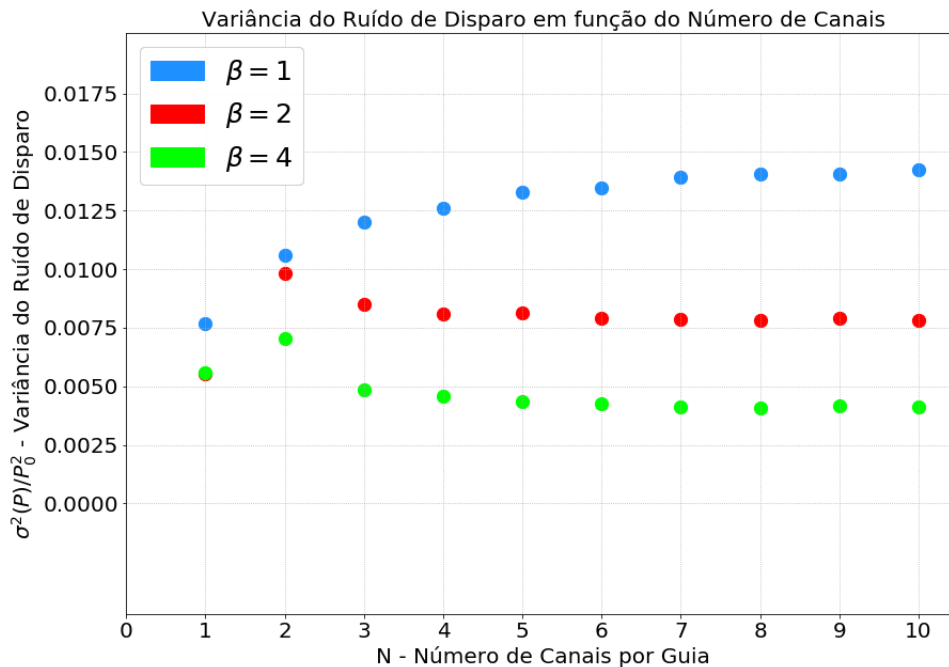
Figura 23 – Histogramas da Condutância no Ensemble Simplético para os casos $N = 1$, $N = 5$ e $N = 10$.

7.2 Potência do Ruído de Disparo

Para o cálculo da Potência do Ruído de Disparo, utilizamos a Equação 5.47 para obter a média e a variância, dada pela Figura 24.



(a) Média do Ruído de Disparo.



(b) Variância do Ruído.

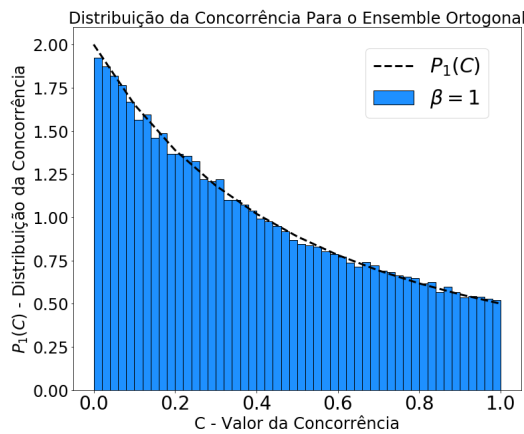
Figura 24 – Média (a) e Variância (b) do Ruído de Disparo em relação ao número de canais tomando como parâmetro a simetria β .

O ruído de disparo está associado a quantizações da carga elétrica. Assim, no

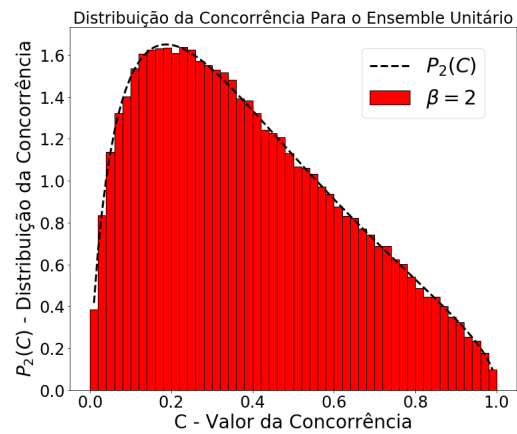
transporte dos elétrons, há uma probabilidade do elétron transmitir ou refletir. Assim, o elétron pode ter sucesso ou não em entrar no ponto quântico, gerando uma distribuição binomial. O aumento de canais aumenta os sucessos relacionados a transmissão e, portanto, aumenta o ruído.

7.3 Concorrência

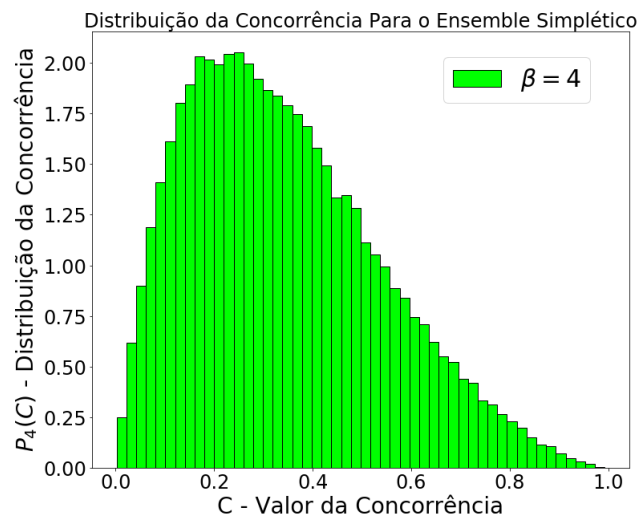
O cálculo da concorrência foi obtido por meio dos auto-valores da matriz $t^\dagger t$. Com estes auto-valores, podemos substituí-los na Equação 6.42 e obter o seu histograma. Assim, os histogramas da concorrência para os Ensembles Ortogonal, Unitário e Simplético são vistos na Figura 25, respectivamente. As funções $P_1(C)$ e $P_2(C)$ nos histogramas



(a) Histograma da Concorrência no Ensemble Ortogonal.



(b) Histograma da Concorrência no Ensemble Unitário.



(c) Histograma da Concorrência no Ensemble Simplético.

Figura 25 – Histogramas da Concorrência nos Ensembles Ortogonal, Unitário e Simplético.

(a) e (b) da Figura 25 são idênticas as encontradas em (GOPAR; FRUSTAGLIA, 2008),

respectivamente:

$$\begin{aligned} P_1(C) &= \frac{2}{(1+C)^2} \\ P_2(C) &= \frac{2C}{(1-C^2)^3} [3(2+3C^2) \operatorname{arctanh} \sqrt{1-C^2} - (11+4C^2)\sqrt{1-C^2}]. \end{aligned} \quad (7.1)$$

Obtivemos a média e variância da concorrência. Para o ensemble Ortogonal, obtivemos a média da concorrência $\langle C \rangle_{\beta=1} \approx 0.3882$ e a variância $\operatorname{var}(C)_{\beta=1} \approx 0.0787$. Já para o ensemble Unitário, a média da concorrência $\langle C \rangle_{\beta=2} \approx 0.3875$ e a variância $\operatorname{var}(C)_{\beta=2} \approx 0.0562$. Nesses dois ensembles, os resultados se aproximaram de (GOPAR; FRUSTAGLIA, 2008) e (BEENAKKER et al., 2004) da seguinte forma:

$$\begin{aligned} |\langle C \rangle_{\text{Beenakker}, \beta=1} - \langle C \rangle_{\text{simulação}, \beta=1}| &= 0.0019, \\ |\operatorname{var}(C)_{\text{Beenakker}, \beta=1} - \operatorname{var}(C)_{\text{simulação}, \beta=1}| &= 0.0005, \\ |\langle C \rangle_{\text{Beenakker}, \beta=2} - \langle C \rangle_{\text{simulação}, \beta=2}| &= 0, \\ |\operatorname{var}(C)_{\text{Beenakker}, \beta=2} - \operatorname{var}(C)_{\text{simulação}, \beta=2}| &= 0.0003. \end{aligned} \quad (7.2)$$

A distribuição do caso simplético $P_4(C)$ não foi encontrada na literatura. No caso simplético, a matriz $t^\dagger t$ apresenta 4 autovalores. Entretanto, estes autovalores são duplamente degenerados, assim a concorrência C foi calculada pela Equação 6.42 usando τ_1 e τ_2 distintos. Dessa forma, encontramos $\langle C \rangle_{\beta=4} \approx 0.34218$ e $\operatorname{var}(C)_{\beta=4} \approx 0.03871$.

7.4 Emaranhamento

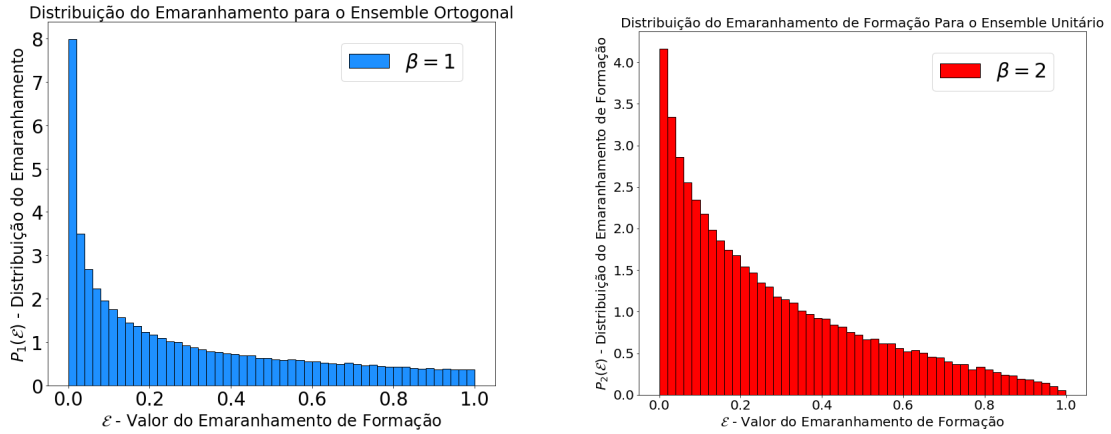
Dado a concorrência, o histograma do Emaranhamento de Formação é obtido usando a Equação 6.33. Os histogramas do Emaranhamento de Formação para os Ensembles Ortogonal, Unitário e Simplético são vistos na Figura 26.

No caso do emaranhamento, obtivemos para o Ensemble Ortogonal a média $\langle \mathcal{E} \rangle_{\beta=1} = 0.2878$ e a variância $\operatorname{var}(\mathcal{E})_{\beta=1} = 0.0791$. Comparando com (GOPAR; FRUSTAGLIA, 2008), temos

$$\begin{aligned} |\langle \mathcal{E} \rangle_{\text{Beenakker}, \beta=1} - \langle \mathcal{E} \rangle_{\text{simulação}, \beta=1}| &= 0.002 \\ |\operatorname{var}(\mathcal{E})_{\text{Beenakker}, \beta=1} - \operatorname{var}(\mathcal{E})_{\text{simulação}, \beta=1}| &= 0.001. \end{aligned} \quad (7.3)$$

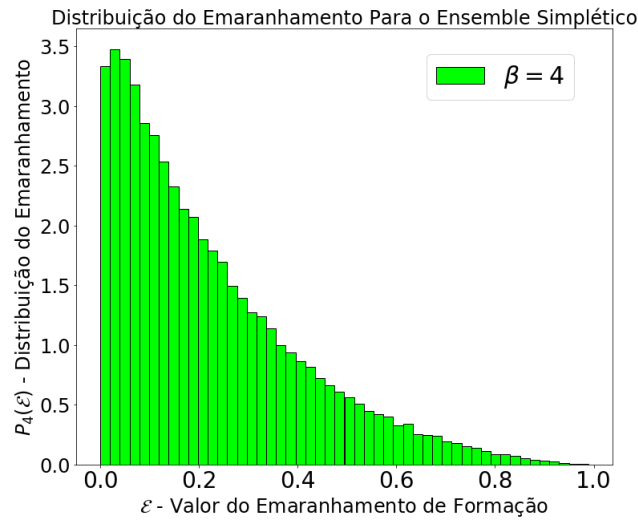
Já para o Ensemble Unitário obtivemos a média $\langle \mathcal{E} \rangle_{\beta=2} = 0.273$ e a variância $\operatorname{var}(\mathcal{E})_{\beta=2} = 0.056$, que estão de acordo com (GOPAR; FRUSTAGLIA, 2008). Para o ensemble simplético, obtivemos $\langle \mathcal{E} \rangle_{\beta=4} \approx 0.2214$ e $\operatorname{var}(\mathcal{E})_{\beta=4} \approx 0.03551$.

Os histogramas do emaranhamento de formação (Figura 26) mostram que $\mathcal{E}$ é aproximadamente nulo para a concorrência $C = 1$. Lembrando que $C = 1$ representa um estado do tipo par de Bell (fortemente emaranhado). Desta forma, como sabemos o estado



(a) Histograma do Emaranhamento de Formação em função da Concorrência no Ensemble Ortogonal.

(b) Histograma do Emaranhamento de Formação em função da Concorrência no Ensemble Unitário.



(c) Histograma do Emaranhamento de Formação em função da Concorrência no Ensemble Simplético.

Figura 26 – Histogramas do Emaranhamento de Formação nos Ensembles Ortogonal (a), Unitário (b) e Simplético (c), respectivamente.

que estamos tratando, a informação obtida ao realizar uma medição é aproximadamente nula. Já para $C \rightarrow 0$, em que o estado é separável, o emaranhamento de formação é alto pois seria raro obter um par emaranhado de um sistema possivelmente separado.

7.5 Parâmetro de Bell-CHSH $\mathcal{S}_{CHSH}$

Daqui em diante, obtivemos resultados inéditos. Fizemos o histograma do parâmetro de Bell $\mathcal{S}_{CHSH}$ para um ponto quântico com 602 ressonâncias, onde consideramos as matrizes unitárias U , que são responsáveis pela misturas de canais, da Equação 6.49 como aleatórias. Além disso, fizemos o histograma para o caso em que há uma defasagem nos canais, proposta de (BEENAKKER et al., 2003). Para obtenção da violação da desigualdade de Bell, é necessário que a barreira seja muito alta, isto é, que a probabilidade de transmissão seja $\Gamma \ll 1$, onde fizemos para $\Gamma = 10^{-4}$. Assim, primeiramente para o ensemble ortogonal, o histograma do parâmetro de Bell-CHSH e do caso com defasagem é dado pela Figura 27.

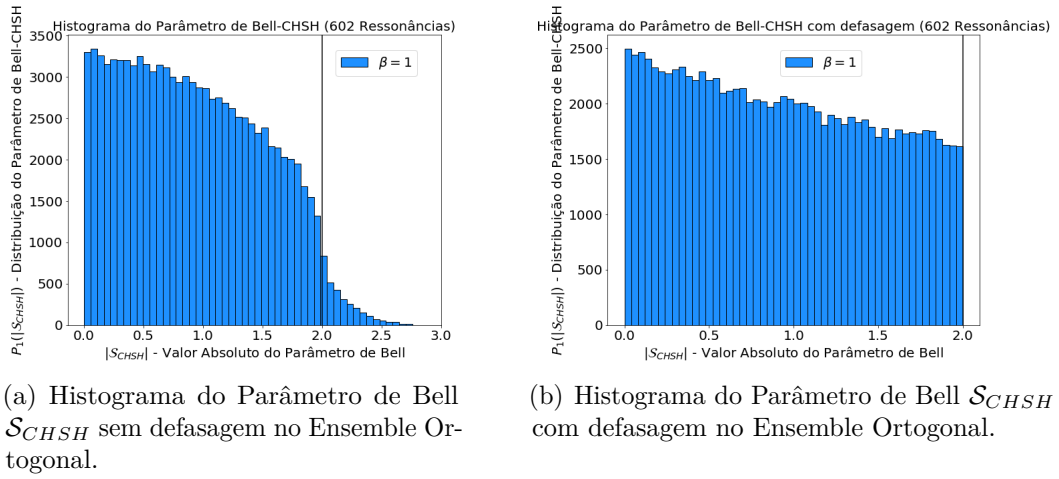
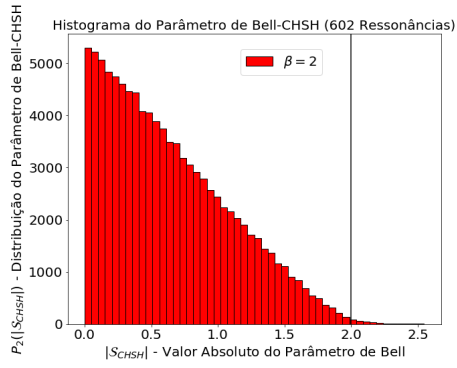


Figura 27 – Histogramas do Parâmetro de Bell $\mathcal{S}_{CHSH}$ sem (a) e com (b) defasagem no Ensemble Ortogonal.

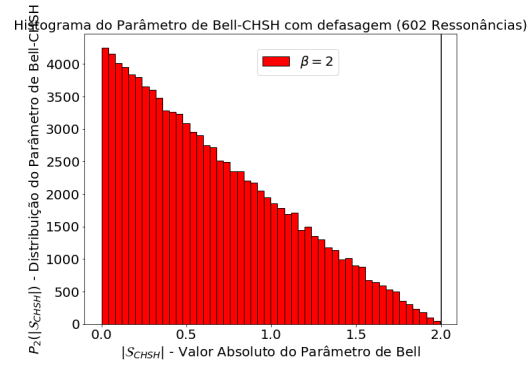
Para o Ensemble Unitário, obtivemos os mesmos histogramas (Parâmetro de Bell sem e com defasagem). Os histogramas podem ser vistos na Figura 28.

Já para o Ensemble Simplético, obtivemos os mesmos histogramas (Parâmetro de Bell sem e com defasagem) que podem ser vistos na Figura 29.

A violação da desigualdade de Bell em pontos quânticos caóticos é um resultado inédito. No estudo do parâmetro de Bell-CHSH $\mathcal{S}_{CHSH}$ exploramos um ponto quântico com 602 ressonâncias. Obtivemos o histograma do parâmetro de Bell para os três Ensembles. Nos três ensembles, ocorreram violações do parâmetro de Bell-CHSH, mostrando que o ponto quântico caótico criou pares emaranhados. Em 100000 realizações em cada ensemble, obtivemos 2915, 283 e 3337 violações para os ensembles Ortogonal, Unitário e Simplético, mostrado nas Figuras 27-(a), 28-(a) e 29(a), respectivamente. Ao introduzir defasagens propostas por (BEENAKKER et al., 2003), obtivemos nenhuma violação nos três ensembles, como podem ser vistas nas Figuras 27-(b), 28-(b) e 29-(b). As defasagens podem ser introduzidas por ruídos externos ao sistema, provocando decoerência do estado

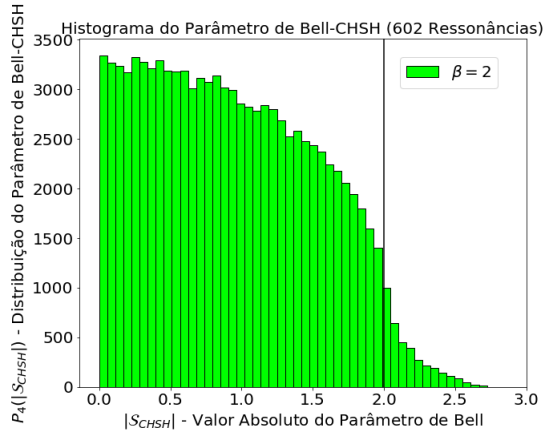


(a) Histograma do Parâmetro de Bell $\mathcal{S}_{CHSH}$ sem defasagem no Ensemble Unitário.

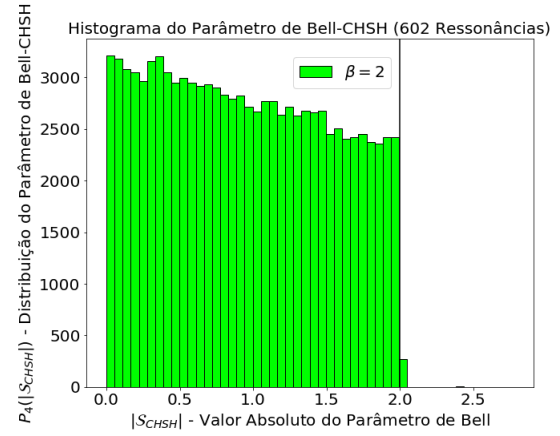


(b) Histograma do Parâmetro de Bell $\mathcal{S}_{CHSH}$ com defasagem no Ensemble Unitário.

Figura 28 – Histogramas do Parâmetro de Bell $\mathcal{S}_{CHSH}$ sem (a) e com (b) defasagem no Ensemble Unitário.



(a) Histograma do Parâmetro de Bell $\mathcal{S}_{CHSH}$ sem defasagem no Ensemble Simplético.



(b) Histograma do Parâmetro de Bell $\mathcal{S}_{CHSH}$ com defasagem no Ensemble Simplético.

Figura 29 – Histogramas do Parâmetro de Bell $\mathcal{S}_{CHSH}$ sem (a) e com (b) defasagem no Ensemble Simplético.

de Bell. A consequência da decoerência é a não-violação da desigualdade de Bell, ficando de acordo com a desigualdade proposta por uma teoria de variáveis aleatórias, dada pela Equação 6.12.

8 Conclusão e Perspectivas

8.1 Conclusões

O regime não-interagente do formalismo de Keldysh é suficiente para estudarmos pontos quânticos caóticos. Ao considerarmos um sistema não-interagente, a fórmula de Meir-Wingreen recupera a fórmula de Landauer-Buttiker. Com isso, podemos obter observáveis como condutância e ruído por meio das funções de Green G . Assim, estudamos o caso particular de um sistema não-interagente a temperatura suficientemente baixa com o objetivo de analisar efeitos quânticos.

Embora o estudo de pontos quânticos caóticos seja um caso particular ao formalismo de Keldysh, é importante notar que, mesmo em temperaturas aproximadamente nulas, ocorrem fenômenos interessantes como, por exemplo, o emaranhamento quântico. (BEENAKKER et al., 2003) mostraram a aplicação de conceitos como emaranhamento e violação da desigualdade de Bell para sistemas mesoscópicos. Além disso, estudamos a concorrência e emaranhamento de formação (WOOTTERS, 1998) para um ponto quântico caótico. Por definição, o emaranhamento de formação é uma informação que quantifica o quão raro pares emaranhados podem ser formados dado o conhecimento prévio da concorrência do sistema. Assim, foi obtido histogramas da concorrência e emaranhamento explorando o Ensemble Gaussiano de Wigner-Dyson.

De forma inédita, também estudamos a conexão entre ruído e emaranhamento no limite opaco proposto por (BEENAKKER, 2005) usando simulação numérica. Mostramos que a desigualdade de Bell é presente em sistemas mesoscópicos, indicando a presença de pares de elétrons emaranhados em relação aos canais do guia esquerdo e direito.

Para finalizar, obtivemos um forte indício de que o caos associado ao ponto quântico caótico gera violações na desigualdade de Bell, consequentemente gera estados emaranhados. Além disso, testamos quando a decoerência é aplicada nos guias, destruindo toda informação quântica associada ao par emaranhado.

8.2 Perspectivas

Em relação aos pontos quânticos caóticos, podemos investigar condutância, ruído, concorrência, emaranhamento de formação e a violação da desigualdade de Bell em relação a um bilhar de Dirac. Regido pela classe de simetria quirial, os bilhares de Dirac representam pontos quânticos que possuem um grau de liberdade a mais no hamiltoniano, tal grau de liberdade é o de sub-rede. Dessa forma, propriedades como a violação da

desigualdade de Bell pode ser diferente com um centro espalhador com simetria quiral.

Sobre o formalismo de Keldysh, podemos analisar regimes interagentes e outros tipos de pontos quânticos, como modelos de tight-binding, acoplamentos entre níveis de energias, interação elétron-elétron e etc. Além disso, analisar o caso em que os guias estão em equilíbrio térmico em temperaturas finitas com o objetivo de verificar se a temperatura pode destruir a informação quântica e se há alguma forma de preservar a coerência dos estados.

Na parte computacional, temos como objetivo o aumento da precisão e eficiência dos algoritmos, isto é, aumentar o número de ressonâncias no ponto quântico e o número de realizações, com o intuito de melhorar cumulantes estatísticos como média, variância e etc. Além disso, podemos investigar a dependência do número de violações da desigualdade de Bell em relação a quantidade de ressonâncias ou transparência da barreira.

Referências

ALMEIDA, F. A. G. d. *Algoritmos numéricos de matrizes aleatórias aplicados a sistemas mesoscópicos*. Tese (Doutorado) — Tese (Doutorado em Física). Universidade Federal de Pernambuco, 2010. Citado na página 54.

BEENAKKER, C. Electron-hole entanglement in the fermi sea. *arXiv preprint cond-mat/0508488*, 2005. Citado 2 vezes nas páginas 71 e 87.

BEENAKKER, C. et al. Entanglement production in a chaotic quantum dot. In: *Fundamental Problems of Mesoscopic Physics*. [S.l.]: Springer, 2004. p. 167–177. Citado na página 83.

BEENAKKER, C. W. J. et al. Proposal for production and detection of entangled electron-hole pairs in a degenerate electron gas. *Phys. Rev. Lett.*, American Physical Society, v. 91, p. 147901, Oct 2003. Disponível em: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.91.147901>. Citado 4 vezes nas páginas 71, 75, 85 e 87.

BELL, J. S. On the einstein podolsky rosen paradox. *Physics Physique Fizika*, APS, v. 1, n. 3, p. 195, 1964. Citado na página 28.

BELL, J. S. Speakable and unspeakable in quantum mechanics. *Cambridge University*, 1987. Citado na página 28.

BLANTER, Y. M.; BÜTTIKER, M. Shot noise in mesoscopic conductors. *Physics reports*, Elsevier, v. 336, n. 1-2, p. 1–166, 2000. Citado 3 vezes nas páginas 63, 64 e 66.

BOHM, D. A suggested interpretation of the quantum theory in terms of "hidden"variables. i. *Phys. Rev.*, American Physical Society, v. 85, p. 166–179, Jan 1952. Disponível em: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.85.166>. Citado na página 28.

BOHM, D.; AHARONOV, Y. Discussion of experimental proof for the paradox of einstein, rosen, and podolsky. *Physical Review*, APS, v. 108, n. 4, p. 1070, 1957. Citado 2 vezes nas páginas 27 e 68.

BROUWER, P.; BEENAKKER, C. Diagrammatic method of integration over the unitary group, with applications to quantum transport in mesoscopic systems. *Journal of Mathematical Physics*, AIP, v. 37, n. 10, p. 4904–4934, 1996. Citado na página 64.

CAVALCANTI, E. et al. Spin entanglement, decoherence and bohm's epr paradox. *Optics Express*, Optical Society of America, v. 17, n. 21, p. 18693–18702, 2009. Citado 2 vezes nas páginas 11 e 27.

CLAUSER, J. F. et al. Proposed experiment to test local hidden-variable theories. *Phys. Rev. Lett.*, American Physical Society, v. 23, p. 880–884, Oct 1969. Disponível em: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.23.880>. Citado na página 69.

DYSON, F. J. Correlations between eigenvalues of a random matrix. *Comm. Math. Phys.*, Springer, v. 19, n. 3, p. 235–250, 1970. Disponível em: <https://projecteuclid.org:443/euclid.cmp/1103842703>. Citado na página 56.

EINSTEIN, A.; PODOLSKY, B.; ROSEN, N. Can quantum-mechanical description of physical reality be considered complete? *Physical review*, APS, v. 47, n. 10, p. 777, 1935. Citado 2 vezes nas páginas 27 e 68.

FETTER, A.; WALECKA, J. *Quantum Theory of Many-particle Systems*. Dover Publications, 2003. (Dover Books on Physics). ISBN 9780486428277. Disponível em: <<https://books.google.com.br/books?id=0wekf1s83b0C>>. Citado 5 vezes nas páginas 11, 35, 37, 38 e 39.

FEYNMAN, R. P. Space-time approach to quantum electrodynamics. *Phys. Rev.*, American Physical Society, v. 76, p. 769–789, Sep 1949. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.76.769>>. Citado na página 37.

FOLK, J. A. et al. Statistics and parametric correlations of coulomb blockade peak fluctuations in quantum dots. *Phys. Rev. Lett.*, American Physical Society, v. 76, p. 1699–1702, Mar 1996. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.76.1699>>. Citado 2 vezes nas páginas 12 e 49.

FYODOROV, Y. V.; SOMMERS, H.-J. Statistics of resonance poles, phase shifts and time delays in quantum chaotic scattering: Random matrix approach for systems with broken time-reversal invariance. *Journal of Mathematical Physics*, AIP, v. 38, n. 4, p. 1918–1981, 1997. Citado na página 53.

GELL-MANN, M.; LOW, F. Bound states in quantum field theory. *Physical Review*, American Physical Society (APS), v. 84, n. 2, p. 350–354, out. 1951. Disponível em: <<https://doi.org/10.1103/physrev.84.350>>. Citado na página 24.

GOPAR, V. A.; FRUSTAGLIA, D. Statistics of orbital entanglement production in quantum-chaotic dots. *Physical Review B*, APS, v. 77, n. 15, p. 153403, 2008. Citado 2 vezes nas páginas 82 e 83.

HANSON, R. et al. Spins in few-electron quantum dots. *Reviews of modern physics*, APS, v. 79, n. 4, p. 1217, 2007. Citado 3 vezes nas páginas 11, 26 e 27.

HAUG, H.; JAUHO, A.-P. *Quantum kinetics in transport and optics of semiconductors*. [S.l.]: Springer, 2008. v. 2. Citado 4 vezes nas páginas 11, 46, 63 e 98.

JAUHO, A. Introduction to the keldysh nonequilibrium green function technique. *Lect. notes*, v. 17, 2006. Citado na página 48.

KELDYSH, L. V. et al. Diagram technique for nonequilibrium processes. *Sov. Phys. JETP*, v. 20, n. 4, p. 1018–1026, 1965. Citado na página 40.

KLEINERT, H. *Path Integrals in Quantum Mechanics, Statistics, Polymer Physics, and Financial Markets*. World Scientific, 2009. (EBL-Schweitzer). ISBN 9789814273572. Disponível em: <<https://books.google.com.br/books?id=VJ1qNz5xYzkC>>. Citado na página 22.

LANGRETH, D. C. et al. *Linear and nonlinear electron transport in solids*. [S.l.]: Plenum New York, 1976. Citado na página 44.

MATSUBARA, T. A new approach to quantum-statistical mechanics. *Progress of theoretical physics*, Oxford University Press, v. 14, n. 4, p. 351–378, 1955. Citado na página 40.

MEIR, Y.; WINGREEN, N. S. Landauer formula for the current through an interacting electron region. *Phys. Rev. Lett.*, American Physical Society, v. 68, p. 2512–2515, Apr 1992. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.68.2512>>. Citado 2 vezes nas páginas 60 e 63.

NAKATSUJI, N. Mesoscopic science, where materials become life and life inspires materials. a great opportunity to push back the frontiers of life, materials, and biomaterials sciences. *Biomaterials Science*, Royal Society of Chemistry, v. 1, n. 1, p. 9–10, 2013. Citado 2 vezes nas páginas 11 e 26.

NAUEN, A. et al. Shot noise in tunneling through a single quantum dot. *Physical Review B*, APS, v. 70, n. 3, p. 033305, 2004. Citado 3 vezes nas páginas 12, 66 e 67.

OBERHOLZER, S. et al. Shot noise of series quantum point contacts intercalating chaotic cavities. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 66, p. 233304, Dec 2002. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.66.233304>>. Citado 2 vezes nas páginas 12 e 51.

POPESCU, S.; ROHRLICH, D. Generic quantum nonlocality. *Physics Letters A*, Elsevier, v. 166, n. 5-6, p. 293–297, 1992. Citado na página 75.

RAMOS, J. *Modelo sigma não linear supersimétrico: aplicações em nanoestruturas caóticas 2010. 200 f.* Tese (Doutorado) — Tese (Doutorado em Física). Universidade Federal de Pernambuco, Recife, 2010. Citado 2 vezes nas páginas 12 e 50.

RYNDYK, D. A. et al. Theory of quantum transport at nanoscale. *Springer Series in Solid-State Sciences*, Springer, v. 184, 2016. Citado 2 vezes nas páginas 12 e 54.

SANTOS, E. H. d. et al. Simulação computacional da produção de emaranhamento em ponto quântico caótico não ideal para ensembles de wigner-dyson. Universidade Federal de Sergipe, 2015. Citado 2 vezes nas páginas 12 e 51.

SHANNON, C. E. A mathematical theory of communication. *Bell system technical journal*, Wiley Online Library, v. 27, n. 3, p. 379–423, 1948. Citado na página 72.

SOUZA, F. M. d. *Transporte quântico em spintrônica: corrente e shot noise via funções de Green de não equilíbrio.* Tese (Doutorado) — Tese (Doutorado em Física). Universidade de São Paulo, 2004. Citado 2 vezes nas páginas 65 e 66.

STEFANUCCI, G.; LEEUWEN, R. V. *Nonequilibrium many-body theory of quantum systems: a modern introduction.* [S.l.]: Cambridge University Press, 2013. Citado 5 vezes nas páginas 11, 41, 42, 43 e 44.

WICK, G. C. The evaluation of the collision matrix. *Phys. Rev.*, American Physical Society, v. 80, p. 268–272, Oct 1950. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.80.268>>. Citado na página 36.

WIGNER, E. P. Characteristic vectors of bordered matrices with infinite dimensions. *Annals of Mathematics*, Annals of Mathematics, v. 62, n. 3, p. 548–564, 1955. ISSN 0003486X. Disponível em: <<http://www.jstor.org/stable/1970079>>. Citado na página 56.

WOOTTERS, W. K. Entanglement of formation of an arbitrary state of two qubits. *Physical Review Letters*, APS, v. 80, n. 10, p. 2245, 1998. Citado 3 vezes nas páginas 71, 73 e 87.

Apêndices

APÊNDICE A – Dedução da Matriz de Espalhamento

Com a equação

$$S = (\mathbb{1} - iF)(\mathbb{1} + iF)^{-1}, \text{ onde } F = \pi\hat{W}^\dagger(E - \hat{H}_{ri})^{-1}\hat{W}, \quad (\text{A.1})$$

podemos organizar S da seguinte forma:

$$\begin{aligned} S &= (\mathbb{1} - iF)(\mathbb{1} + iF)^{-1} = (\mathbb{1} + iF - iF - iF)(\mathbb{1} + iF)^{-1}, \\ &= (\mathbb{1} + iF)(\mathbb{1} + iF)^{-1} - 2iF(\mathbb{1} + iF)^{-1} = \mathbb{1} - 2iF(\mathbb{1} + iF)^{-1}. \end{aligned} \quad (\text{A.2})$$

Podemos agora substituir o F , e assim temos

$$\begin{aligned} S &= \mathbb{1} - 2i\pi\hat{W}^\dagger(E - \hat{H}_{ri})^{-1}\hat{W}(\mathbb{1} + i\pi\hat{W}^\dagger(E - \hat{H}_{ri})^{-1}\hat{W})^{-1}, \\ &= \mathbb{1} - 2i(\pi\hat{W}^\dagger(E - \hat{H}_{ri})^{-1}\hat{W}) \sum_{l=0}^{\infty} (i\pi\hat{W}^\dagger(E - \hat{H}_{ri})^{-1}\hat{W})^l, \\ &= \mathbb{1} - 2 \sum_{l=0}^{\infty} (i\pi\hat{W}^\dagger(E - \hat{H}_{ri})^{-1}\hat{W})^{l+1}, \\ &= \mathbb{1} - 2 \left[i\pi\hat{W}^\dagger(E - \hat{H}_{ri})^{-1}\hat{W} + (i\pi)^2\hat{W}^\dagger(E - \hat{H}_{ri})^{-1}\hat{W}\hat{W}^\dagger(E - \hat{H}_{ri})^{-1}\hat{W} + \dots \right], \\ &= \mathbb{1} - 2i\pi\hat{W}^\dagger \left[\mathbb{1} + i\pi(E - \hat{H}_{ri})^{-1}\hat{W}\hat{W}^\dagger + \dots \right] (E - \hat{H}_{ri})^{-1}\hat{W}, \\ &= \mathbb{1} - 2i\pi\hat{W}^\dagger \left[\sum_{l=0}^{\infty} (i\pi(E - \hat{H}_{ri})^{-1}\hat{W}\hat{W}^\dagger)^l \right] (E - \hat{H}_{ri})^{-1}\hat{W}, \\ &= \mathbb{1} - 2\pi i\hat{W}^\dagger \left[\mathbb{1} + i\pi(E - \hat{H}_{ri})^{-1}\hat{W}\hat{W}^\dagger \right]^{-1} (E - \hat{H}_{ri})^{-1}\hat{W}, \\ &= \mathbb{1} - 2\pi i\hat{W}^\dagger ((E - \hat{H}_{ri}) + i\pi\hat{W}\hat{W}^\dagger)\hat{W}, \\ S &= \mathbb{1} - 2i\pi\hat{W}^\dagger(E - \hat{H}_{ri} + i\pi\hat{W}\hat{W}^\dagger)\hat{W}, \end{aligned} \quad (\text{A.3})$$

onde usamos da primeira para a segunda igualdade e da sexta igualdade para a sétima a definição de série geométrica e sua convergência.

APÊNDICE B – Equação de Keldysh

Substituindo a eq.(3.27) na Equação de Dyson, obtemos a seguinte expressão:

$$G^< = G_0^< + G_0^r \Sigma^r G^< + G_0^r \Sigma^< G^a + G_0^< \Sigma^a G^a, \quad (\text{B.1})$$

fazendo uma iteração, temos:

$$\begin{aligned} G^< &= G_0^< + G_0^r \Sigma^r \left(\underbrace{G_0^< + G_0^r \Sigma^r G^< + G_0^r \Sigma^< G^a + G_0^< \Sigma^a G^a}_{G^<} \right) + G_0^r \Sigma^< G^a + G_0^< \Sigma^a G^a \\ &= \underbrace{G_0^<}_1 + \underbrace{G_0^r \Sigma^r G_0^<}_1 + G_0^r \Sigma^r G_0^r \Sigma^r G^< + \underbrace{G_0^r \Sigma^r G_0^r \Sigma^< G^a}_2 + \underbrace{G_0^r \Sigma^r G_0^< \Sigma^a G^a}_3 + \underbrace{G_0^r \Sigma^< G^a}_2 + \underbrace{G_0^< \Sigma^a G^a}_3 \\ &= \underbrace{(1 + G_0^r \Sigma^r) G_0^<}_1 + G_0^r \Sigma^r G_0^r \Sigma^r G^< + \underbrace{(G_0^r + G_0^r \Sigma^r G_0^r) \Sigma^< G^a}_2 + \underbrace{(1 + G_0^r \Sigma^r) G_0^< \Sigma^a G^a}_3 \\ &= \underbrace{(1 + G_0^r \Sigma^r) G_0^< (1 + \Sigma^a G^a)}_{1+3} + \underbrace{(G_0^r + G_0^r \Sigma^r G_0^r) \Sigma^< G^a}_2 + G_0^r \Sigma^r G_0^r \Sigma^r G^<. \end{aligned} \quad (\text{B.2})$$

onde colocamos indicadores 1, 2 e 3 para mostrar quais termos seriam agrupados. Realizando outra iteração, temos:

$$\begin{aligned} G^< &= \underbrace{(1 + G_0^r \Sigma^r) G_0^< (1 + \Sigma^a G^a)}_{1+3} + \underbrace{(G_0^r + G_0^r \Sigma^r G_0^r) \Sigma^< G^a}_2 \\ &\quad + G_0^r \Sigma^r G_0^r \Sigma^r \left(\underbrace{G_0^< + G_0^r \Sigma^r G^< + G_0^r \Sigma^< G^a + G_0^< \Sigma^a G^a}_{G^<} \right), \\ &= \underbrace{(1 + G_0^r \Sigma^r) G_0^< (1 + \Sigma^a G^a)}_{1+3} + \underbrace{(G_0^r + G_0^r \Sigma^r G_0^r) \Sigma^< G^a}_2 + \underbrace{G_0^r \Sigma^r G_0^r \Sigma^r G_0^< (1 + \Sigma^a G^a)}_4 \\ &\quad + \underbrace{G_0^r \Sigma^r G_0^r \Sigma^r G_0^r \Sigma^< G^a}_5 + G_0^r \Sigma^r G_0^r \Sigma^r G_0^r \Sigma^r G^<, \\ &= \underbrace{(1 + G_0^r \Sigma^r + G_0^r \Sigma^r G_0^r \Sigma^r) G_0^< (1 + \Sigma^a G^a)}_{1+3+4} + \underbrace{(G_0^r + G_0^r \Sigma^r G_0^r) \Sigma^< G^a}_2 \\ &\quad + \underbrace{(G_0^r + G_0^r \Sigma^r G_0^r + G_0^r \Sigma^r G_0^r \Sigma^r G_0^r) \Sigma^< G^a}_{2+5} + G_0^r \Sigma^r G_0^r \Sigma^r G_0^r \Sigma^r G^<. \end{aligned} \quad (\text{B.3})$$

fazendo infinitas iterações, obtemos:

$$G^< = \left[1 + (G_0 + G_0^r \Sigma^r G_0^r + \dots) \Sigma^r \right] G_0^< \left[1 + \Sigma^a G^a \right] + (G_0^r + G_0^r \Sigma^r G_0^r + \dots) \Sigma^< G^a, \quad (\text{B.4})$$

Podemos fazer a identificação da função de Green retardada no regime interagente G^r como uma expansão em termos da função de Green não interagente $G^r(0)$ e a auto-energia

Σ^r :

$$G^r = G_0^r + G_0^r \Sigma^r G_0^r + \dots = G_0^r + G_0^r \Sigma^r G^r. \quad (\text{B.5})$$

Assim, obtemos:

$$G^< = [1 + G^r \Sigma^r] G_0^< [1 + \Sigma^a G^a] + G^r \Sigma^< G^a \quad (\text{B.6})$$

A identificação usada na eq.(B.5) pode ser verificada usando as equações de Langreth na Equação de Dyson.

APÊNDICE C – Técnica de Equação de Movimento.

Nosso interesse é utilizar a técnica de equação de movimento para a função de Green $G_{n,\mathbf{k}\alpha}^t(t-t')$. Assim, derivando em relação à $-i\frac{\partial}{\partial t}$, temos:

$$\begin{aligned}
 -i\frac{\partial}{\partial t'}G_{n,\mathbf{k}\alpha}^t(t-t') &= -i\frac{\partial}{\partial t'}\left[\theta(t-t')G_{n,\mathbf{k}\alpha}^>(t-t') + \theta(t'-t)G_{n,\mathbf{k}\alpha}^<(t-t')\right] \\
 &= -i\left\{\frac{\partial}{\partial t'}\theta(t-t')G_{n,\mathbf{k}\alpha}^>(t-t') + \theta(t-t')\frac{\partial}{\partial t'}G_{n,\mathbf{k}\alpha}^>(t-t') \right. \\
 &\quad \left. + \frac{\partial}{\partial t'}\theta(t'-t)G_{n,\mathbf{k}\alpha}^<(t-t') + \theta(t'-t)\frac{\partial}{\partial t'}G_{n,\mathbf{k}\alpha}^<(t-t')\right\} \\
 &= -i\left\{-\delta(t-t')G_{n,\mathbf{k}\alpha}^>(t-t') + \theta(t-t')\frac{\partial}{\partial t'}G_{n,\mathbf{k}\alpha}^>(t-t') \right. \\
 &\quad \left. + \delta(t'-t)G_{n,\mathbf{k}\alpha}^<(t-t') + \theta(t'-t)\frac{\partial}{\partial t'}G_{n,\mathbf{k}\alpha}^<(t-t')\right\} \tag{C.1} \\
 &= -i\left\{-\delta(t-t')G_{n,\mathbf{k}\alpha}^>(t-t') + \delta(t'-t)G_{n,\mathbf{k}\alpha}^<(t-t')\right\} \\
 &\quad -i\left\{\theta(t-t')\frac{\partial}{\partial t'}G_{n,\mathbf{k}\alpha}^>(t-t') + \theta(t'-t)\frac{\partial}{\partial t'}G_{n,\mathbf{k}\alpha}^<(t-t')\right\} \\
 &= -i\left\{-\delta(t-t')G_{n,\mathbf{k}\alpha}^>(t-t') + \delta(t'-t)G_{n,\mathbf{k}\alpha}^<(t-t')\right\} \\
 &\quad -i\left\{\theta(t-t')\frac{\partial}{\partial t'}\left(-i\langle d_n(t)c_{\mathbf{k}\alpha}^\dagger(t')\rangle\right) + \theta(t'-t)\frac{\partial}{\partial t'}\left(i\langle c_{\mathbf{k}\alpha}^\dagger(t')d_n(t)\rangle\right)\right\}
 \end{aligned}$$

Assim, aplicando a derivada em relação a t' , temos:

$$\begin{aligned}
 -i\frac{\partial}{\partial t'}G_{n,\mathbf{k}\alpha}^t(t-t') &= -i\left\{-\delta(t-t')G_{n,\mathbf{k}\alpha}^>(t-t') + \delta(t'-t)G_{n,\mathbf{k}\alpha}^<(t-t')\right\} \\
 &\quad -i\left\{\theta(t-t')\left(-i\langle d_n(t)\frac{\partial}{\partial t'}c_{\mathbf{k}\alpha}^\dagger(t')\rangle\right) + \theta(t'-t)\left(i\langle\frac{\partial}{\partial t'}c_{\mathbf{k}\alpha}^\dagger(t')d_n(t)\rangle\right)\right\} \\
 &= -i\left\{-\delta(t-t')G_{n,\mathbf{k}\alpha}^>(t-t') + \delta(t'-t)G_{n,\mathbf{k}\alpha}^<(t-t')\right\} \\
 &\quad -\theta(t-t')\langle d_n(t)\frac{\partial}{\partial t'}c_{\mathbf{k}\alpha}^\dagger(t')\rangle + \theta(t'-t)\langle\frac{\partial}{\partial t'}c_{\mathbf{k}\alpha}^\dagger(t')d_n(t)\rangle, \tag{C.2}
 \end{aligned}$$

onde usamos que $G_{n,\mathbf{k}\alpha}^>(t-t') = -i \langle d_n(t) c_{\mathbf{k}\alpha}^\dagger(t') \rangle$, enquanto que $G_{n,\mathbf{k}\alpha}^<(t-t') = i \langle c_{\mathbf{k}\alpha}^\dagger(t') d_n(t) \rangle$. Só que é importante lembrar que:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial t'} c_{\mathbf{k}\alpha}^\dagger(t') &= [c_{\mathbf{k}\alpha}^\dagger, \hat{H}](t') \\
&= \sum_{\mathbf{k}', \alpha' \in L, R} \epsilon_{\mathbf{k}'\alpha'} [c_{\mathbf{k}\alpha}^\dagger, c_{\mathbf{k}'\alpha'}^\dagger c_{\mathbf{k}'\alpha'}] + \sum_{\mathbf{k}', \alpha' \in L, R; n} V_{\mathbf{k}'\alpha', n} \underbrace{[c_{\mathbf{k}\alpha}^\dagger, c_{\mathbf{k}'\alpha'}^\dagger d_{n'}]}_0 + V_{\mathbf{k}'\alpha', n'}^* [c_{\mathbf{k}\alpha}^\dagger, d_{n'}^\dagger c_{\mathbf{k}'\alpha'}] \\
&= \sum_{\mathbf{k}', \alpha' \in L, R} \epsilon_{\mathbf{k}'\alpha'} c_{\mathbf{k}\alpha}^\dagger(t') \delta_{\mathbf{k}', \mathbf{k}} \delta_{\alpha, \alpha'} + \sum_{\mathbf{k}', \alpha' \in L, R; n} V_{\mathbf{k}'\alpha', n}^\dagger d_{n'}^\dagger(t') \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \\
&= \epsilon_{\mathbf{k}\alpha} c_{\mathbf{k}\alpha}^\dagger(t') + \sum_{n'} V_{\mathbf{k}\alpha, n'}^* d_{n'}^\dagger(t').
\end{aligned} \tag{C.3}$$

Assim,

$$\begin{aligned}
-i \frac{\partial}{\partial t'} G_{n,\mathbf{k}\alpha}^t(t-t') &= - \left\{ -\delta(t-t') G_{n,\mathbf{k}\alpha}^>(t-t') + \delta(t'-t) G_{n,\mathbf{k}\alpha}^<(t-t') \right\} \\
&\quad - \theta(t-t') \left\{ \epsilon_{\mathbf{k}\alpha} \langle d_n(t) c_{\mathbf{k}\alpha}^\dagger \rangle + \sum_{n'} V_{\mathbf{k}\alpha, n'}^* \langle d_n(t) d_{n'}^\dagger(t') \rangle \right\} \\
&\quad + \theta(t'-t) \left\{ \epsilon_{\mathbf{k}\alpha} \langle c_{\mathbf{k}\alpha}^\dagger(t') d_n(t) \rangle + \sum_{n'} V_{\mathbf{k}\alpha, n'}^* \langle d_{n'}^\dagger d_n(t) \rangle \right\}.
\end{aligned} \tag{C.4}$$

Portanto, temos:

$$-i \frac{\partial}{\partial t'} G_{n,\mathbf{k}\alpha}^t(t-t') = -i \left\{ -\delta(t-t') G_{n,\mathbf{k}\alpha}^> + \delta(t'-t) G_{n,\mathbf{k}\alpha}^< \right\} + \epsilon_{\mathbf{k}\alpha} G_{n,\mathbf{k}\alpha}^t(t-t') + \sum_{n'} G_{n,n'}^t(t-t') V_{\mathbf{k}\alpha, n'}^*. \tag{C.5}$$

Como a contribuição dos termos com deltas de Dirac são irrelevantes ([HAUG; JAUHO, 2008](#)), temos:

$$-i \frac{\partial}{\partial t'} G_{n,\mathbf{k}\alpha}^t(t-t') = \epsilon_{\mathbf{k}\alpha} G_{n,\mathbf{k}\alpha}^t(t-t') + \sum_{n'} G_{n,n'}^t(t-t') V_{\mathbf{k}\alpha, n'}^*. \tag{C.6}$$

APÊNDICE D – Desigualdade de Bell

Assumindo que o valor absoluto da diferença entre $\overline{P}(\vec{a}, \vec{b})$ e $-\vec{a} \cdot \vec{b}$ é menor que um ϵ arbitrário:

$$|\overline{P}(\vec{a}, \vec{b}) + \overline{\vec{a} \cdot \vec{b}}| \leq \epsilon. \quad (\text{D.1})$$

Precisamos mostrar que dado um δ tal que:

$$|\overline{\vec{a} \cdot \vec{b}} - \vec{a} \cdot \vec{b}| \leq \delta, \quad (\text{D.2})$$

não é possível encontrar um ϵ suficientemente pequeno na Equação D.1. Sabemos que:

$$\begin{aligned} |\overline{P}(\vec{a}, \vec{b}) + \vec{a} \cdot \vec{b}| &\leq |\overline{P}(\vec{a}, \vec{b}) + \overline{\vec{a} \cdot \vec{b}}| + |\vec{a} \cdot \vec{b} - \overline{\vec{a} \cdot \vec{b}}| \\ &\leq \epsilon + \delta. \end{aligned} \quad (\text{D.3})$$

$\overline{P}(\vec{a}, \vec{b})$ pode ser escrito na forma:

$$\overline{P}(\vec{a}, \vec{b}) = \int d\lambda \overline{A}(\vec{a}, \lambda) \overline{B}(\vec{b}, \lambda), \text{ onde } |\overline{A}(\vec{a}, \lambda)| \leq 1 \text{ e } |\overline{B}(\vec{b}, \lambda)| \leq 1. \quad (\text{D.4})$$

Fazendo $\vec{a} = \vec{b}$, temos da Equação D.3:

$$\left| \int \rho(\lambda) (\overline{A}(\vec{b}, \lambda) \overline{B}(\vec{b}, \lambda) + 1) d\lambda \right| \leq \epsilon + \delta. \quad (\text{D.5})$$

Por outro lado,

$$\begin{aligned} |\overline{P}(\vec{a}, \vec{b}) - \overline{P}(\vec{a}, \vec{c})| &= \int d\lambda \rho(\lambda) [\overline{A}(\vec{a}, \lambda) \overline{B}(\vec{b}, \lambda) - \overline{A}(\vec{a}, \lambda) \overline{B}(\vec{c}, \lambda)] \\ &= \int d\lambda \rho(\lambda) \overline{A}(\vec{a}, \lambda) \overline{B}(\vec{b}, \lambda) [1 + \overline{A}(\vec{b}, \lambda) \overline{B}(\vec{c}, \lambda)] \\ &\quad - \int d\lambda \rho(\lambda) \overline{A}(\vec{a}, \lambda) \overline{B}(\vec{c}, \lambda) [1 + \overline{A}(\vec{b}, \lambda) \overline{B}(\vec{b}, \lambda)]. \end{aligned} \quad (\text{D.6})$$

Como $|\overline{A}(\vec{a}, \lambda)|$ e $|\overline{B}(\vec{b}, \lambda)|$ são menores que 1, então:

$$\begin{aligned} |\overline{P}(\vec{a}, \vec{b}) - \overline{P}(\vec{a}, \vec{c})| &\leq \int d\lambda \rho(\lambda) + \int d\lambda \rho(\lambda) \overline{A}(\vec{b}, \lambda) \overline{B}(\vec{c}, \lambda) \\ &\quad + \left| \int \rho(\lambda) (\overline{A}(\vec{b}, \lambda) \overline{B}(\vec{b}, \lambda) + 1) d\lambda \right|. \end{aligned} \quad (\text{D.7})$$

Assim, pela Equação D.5 e pela definição de $\overline{P}(a, b)$, temos:

$$|\overline{P}(\vec{a}, \vec{b}) - \overline{P}(\vec{a}, \vec{c})| \leq 1 + \overline{P}(\vec{b}, \vec{c}) + (\epsilon + \delta). \quad (\text{D.8})$$

Por outro lado,

$$\begin{aligned} |\overline{P}(\vec{a}, \vec{b}) - \overline{P}(\vec{a}, \vec{c})| &\geq |\overline{P}(\vec{a}, \vec{b}) + \vec{a} \cdot \vec{c}| - |\overline{P}(\vec{a}, \vec{c}) + \vec{a} \cdot \vec{c}| \\ &\geq |\overline{P}(\vec{a}, \vec{b}) + \vec{a} \cdot \vec{c}| - (\epsilon + \delta). \end{aligned} \quad (\text{D.9})$$

Também temos,

$$\begin{aligned}
|\overline{P}(\vec{a}, \vec{b}) + \vec{a} \cdot \vec{c}| &= |\overline{P}(\vec{a}, \vec{b}) + \vec{a} \cdot \vec{b} - \vec{a} \cdot \vec{b} + \vec{a} \cdot \vec{c}| \\
&= |\vec{a} \cdot \vec{c} - \vec{a} \cdot \vec{b} - (-\overline{P}(\vec{a}, \vec{b}) - \vec{a} \cdot \vec{b})| \\
&\geq |\vec{a} \cdot \vec{c} - \vec{a} \cdot \vec{b}| - |\overline{P}(\vec{a}, \vec{b}) + \vec{a} \cdot \vec{b}| \\
&\geq |\vec{a} \cdot \vec{c} - \vec{a} \cdot \vec{b}| - (\epsilon + \delta).
\end{aligned} \tag{D.10}$$

Substituindo a Equação D.10 na Equação D.9, temos:

$$|\overline{P}(\vec{a}, \vec{b}) - \overline{P}(\vec{a}, \vec{c})| \geq |\vec{a} \cdot \vec{c} - \vec{a} \cdot \vec{b}| - 2(\epsilon + \delta). \tag{D.11}$$

Substituindo agora a Equação D.8 em D.12, obtemos:

$$|\vec{a} \cdot \vec{c} - \vec{a} \cdot \vec{b}| - 2(\epsilon + \delta) \leq 1 + \overline{P}(\vec{b}, \vec{c}) + (\epsilon + \delta). \tag{D.12}$$

Note que:

$$\begin{aligned}
\epsilon + \delta &\geq |\overline{P}(\vec{b}, \vec{c}) + \vec{b} \cdot \vec{c}| = |\overline{P}(\vec{b}, \vec{c}) - (-\vec{b} \cdot \vec{c})| \geq |\overline{P}(\vec{b}, \vec{c})| - |(-\vec{b} \cdot \vec{c})| \\
&= \overline{P}(\vec{b}, \vec{c}) - \vec{b} \cdot \vec{c}.
\end{aligned} \tag{D.13}$$

Portanto,

$$\overline{P}(\vec{b}, \vec{c}) \leq \vec{b} \cdot \vec{c} + (\epsilon + \delta). \tag{D.14}$$

Substituindo a Equação D.14 na Equação D.12, obtemos:

$$|\vec{a} \cdot \vec{c} - \vec{a} \cdot \vec{b}| - 2(\epsilon + \delta) \leq 1 - \vec{b} \cdot \vec{c} + 2(\epsilon + \delta), \tag{D.15}$$

ou melhor,

$$4(\epsilon + \delta) \geq |\vec{a} \cdot \vec{c} - \vec{a} \cdot \vec{b}| + \vec{b} \cdot \vec{c} - 1. \tag{D.16}$$

Tomando, por exemplo, $\vec{a} \cdot \vec{c} = 0$, $\vec{a} \cdot \vec{b} = \vec{b} \cdot \vec{c} = \frac{1}{\sqrt{2}}$, temos:

$$4(\epsilon + \delta) \geq \sqrt{2} - 1, \tag{D.17}$$

mostrando que, dado um δ suficientemente pequeno, não é possível encontrar ϵ arbitrariamente pequeno.

APÊNDICE E – Violação da Desigualdade de Bell na Mecânica Quântica

Sejam A_0 e A_1 observáveis de Alice. Sejam B_0 e B_1 observáveis de Bob. Podemos definir o parâmetro de Bell $\mathcal{S}_{CHSH}$ como:

$$\hat{\mathcal{S}}_{CHSH} = A_0 \otimes B_0 + A_0 \otimes B_1 + A_1 \otimes B_0 - A_1 \otimes B_1. \quad (\text{E.1})$$

Como $|\psi\rangle = |a\rangle \otimes |b\rangle$, temos:

$$\langle A_0 \otimes B_0 \rangle_{|\psi\rangle} = \langle \psi | A_0 \otimes B_0 | \psi \rangle, \quad (\text{E.2})$$

onde o parâmetro da desigualdade de Bell é dado por:

$$\mathcal{S}_{CHSH} = \langle \mathcal{S}_{CHSH} \rangle = \langle A_0 \otimes B_0 \rangle + \langle A_0 \otimes B_1 \rangle + \langle A_1 \otimes B_0 \rangle - \langle A_1 \otimes B_1 \rangle. \quad (\text{E.3})$$

Suponha que Alice e Bob compartilham o estado:

$$|\psi\rangle = \frac{|01\rangle - |10\rangle}{\sqrt{2}} = \frac{1}{\sqrt{2}}[|0\rangle \otimes |1\rangle - |1\rangle \otimes |0\rangle] = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ -1 \\ 0 \end{bmatrix}. \quad (\text{E.4})$$

Se Alice realiza as medições $A_0 = \sigma_1$ e $A_1 = \sigma_3$, enquanto que Bob realiza as medições $B_0 = \frac{\sigma_1 + \sigma_3}{\sqrt{2}}$ e $B_1 = \frac{\sigma_1 - \sigma_3}{\sqrt{2}}$, o primeiro termo fica:

$$\begin{aligned} A_0 \otimes B_0 &= \sigma_1 \otimes \left(\frac{\sigma_1 + \sigma_3}{\sqrt{2}} \right) \\ &= \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \otimes \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \right\} \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & -1 \\ 1 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & -1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (\text{E.5})$$

Então,

$$\langle \psi | A_0 \otimes B_0 | \psi \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & -1 & 0 \end{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & -1 \\ 1 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & -1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix} = -\frac{1}{\sqrt{2}} \quad (\text{E.6})$$

De forma análoga, podemos obter os outros termos:

$$\begin{aligned}
 \langle \psi | A_0 \otimes B_1 | \psi \rangle &= -\frac{1}{\sqrt{2}} \\
 \langle \psi | A_1 \otimes B_0 | \psi \rangle &= -\frac{1}{\sqrt{2}} \\
 \langle \psi | A_1 \otimes B_1 | \psi \rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}
 \end{aligned} \tag{E.7}$$

Assim, obtemos no final:

$$\begin{aligned}
 \langle \mathcal{S}_{CHSH} \rangle &= \langle A_0 \otimes B_0 \rangle + \langle A_0 \otimes B_1 \rangle + \langle A_1 \otimes B_0 \rangle - \langle A_1 \otimes B_1 \rangle \\
 &= \left(-\frac{1}{\sqrt{2}} \right) + \left(-\frac{1}{\sqrt{2}} \right) + \left(-\frac{1}{\sqrt{2}} \right) - \left(\frac{1}{\sqrt{2}} \right) = -2\sqrt{2}
 \end{aligned} \tag{E.8}$$

Assim, obtemos a violação da desigualdade de Bell:

$$| \langle \mathcal{S}_{CHSH} \rangle | = 2\sqrt{2} > 2. \tag{E.9}$$

APÊNDICE F – Relação do Correlator e o Ruído

A Equação 6.46 pode ser vista da seguinte forma:

$$\begin{aligned}
 \text{Tr } r^\dagger r t^\dagger t &= \text{Tr} (t r^\dagger r t^\dagger) = \text{Tr} \left((r t^\dagger)^\dagger (r t^\dagger) \right) \\
 &= \text{Tr} (A^\dagger A) = \sum_{i=1}^2 (A^\dagger A)_{ii}, \text{ onde } A = r t^\dagger. \\
 &= \sum_{i=1}^2 \sum_{k=1}^2 A_{ik}^\dagger A_{ki} = \sum_{i=1}^2 \sum_{k=1}^2 A_{ki}^* A_{ki} \\
 &= \sum_{i,k=1}^2 |A_{ki}|^2 = \sum_{i,k=1}^2 |(r t^\dagger)_{ki}|^2 = \sum_{i,k=1}^2 C_{ik} = C_{11} + C_{12} + C_{21} + C_{22}.
 \end{aligned} \tag{F.1}$$

De forma análoga, a Equação 6.47 pode ser obtida por:

$$\begin{aligned}
 \text{Tr } \sigma_z r t^\dagger \sigma_z t r^\dagger &= \text{Tr} \{ \sigma_z r t^\dagger (r t^\dagger \sigma_z)^\dagger \} \\
 &= \text{Tr} \{ (\sigma A) (A \sigma)^\dagger \} = \sum_{i=1}^2 \left[(\sigma_z A) (A \sigma_z)^\dagger \right]_{ii} \\
 &= \sum_{i=1}^2 \left\{ \sum_{k=1}^2 (\sigma_z A)_{ik} (A \sigma_z)_{ki}^\dagger \right\} \\
 &= \text{Tr} \begin{pmatrix} |A_{11}|^2 - |A_{12}|^2 & A_{11} A_{21}^* - A_{12} A_{22}^* \\ -A_{21} A_{11}^* + A_{22} A_{12}^* & -|A_{21}|^2 - |A_{22}|^2 \end{pmatrix} \\
 &= |A_{11}|^2 + |A_{22}|^2 - |A_{12}|^2 - |A_{21}|^2 \\
 &= |(r t^\dagger)_{11}|^2 + |(r t^\dagger)_{22}|^2 - |(r t^\dagger)_{12}|^2 - |(r t^\dagger)_{21}|^2 = C_{11} + C_{22} - C_{12} - C_{21}.
 \end{aligned} \tag{F.2}$$